УДК 621.315.5:537.311/312 **DOI: 10.24151/1561-5405-2020-25-4-299-309**

Метод прогнозирования эффективной проводимости текстурированных поликристаллов с учетом межкристаллитных промежутков

И.В. Лавров

Национальный исследовательский университет «МИЭТ», г. Москва, Россия

iglavr@mail.ru

В реальных поликристаллах кристаллиты отделены друг от друга межзеренным пространством, оказывающим влияние на эффективную проводимость поликристалла. Это влияние тем больше, чем меньше размеры кристаллов. В работе разработан метод прогнозирования эффективной проводимости поликристаллических сред, который учитывает наличие межзеренного пространства. Для построения метода принята модель поликристалла, в которой кристаллиты считаются неоднородными, состоящими из однородного кристаллического анизотропного ядра и однородной изотропной оболочки. В данной модели роль межкристаллитных промежутков играют оболочки кристаллитов. Для вычисления эффективной проводимости поликристалла использовано обобщенное приближение эффективного поля, в качестве параметра среды сравнения принята эффективная проводимость среды, т.е. использован метод самосогласованного решения. На основе разработанного метода для случая сферических кристаллитов со сферической оболочкой получена формула для эффективной проводимости поликристалла в зависимости от тензора проводимости кристаллического ядра, проводимости оболочки и объемной доли ядра в кристаллитах. Данная формула применяется для частных случаев поликристаллической среды, а именно для поликристалла с однотипными кристаллитами с изотропным ядром, в этом случае выражение для эффективной проводимости совпадает с классической формулой Максвелла – Гарнетта; поликристалла с однотипными кристаллитами с анизотропными ядрами при одинаковой ориентации их кристаллографических осей; поликристалла с однотипными кристаллитами с анизотропными ядрами при равномерном распределении ориентаций их кристаллографических осей в пространстве; поликристалла с проводящими ядрами кристаллитов и абсолютно непроводящими оболоч-

© И.В. Лавров, 2020

ками. В последнем случае эффективная проводимость поликристалла обращается в нуль, что полностью согласуется с физическим смыслом.

Ключевые слова: эффективная проводимость; поликристалл; кристаллит; ядро; оболочка; анизотропный; межкристаллитные промежутки; обобщенное приближение эффективного поля; метод самосогласования

Для цитирования: Лавров И.В. Метод прогнозирования эффективной проводимости текстурированных поликристаллов с учетом межкристаллитных промежутков // Изв. вузов. Электроника. 2020. Т. 25. № 4. С. 299–309. DOI: 10.24151/1561-5405-2020-25-4-299-309

Финансирование работы: работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 19-08-00111-а).

Method of Predicting Effective Conductivity of Textured Polycrystals Taking into Account Intergranular Gaps

I.V. Lavrov

National Research University of Electronic Technology, Moscow, Russia

iglavr@mail.ru

Abstract: In real polycrystals the crystallites are separated from each other by an intergranular space, affecting the effective conductivity of the polycrystal. This influence is higher when the less are the dimensions of crystallites. In the work the method of predicting the effective conductivity of polycrystalline media, which takes into account the presence of the intergranular space, has been developed. To construct the method, a polycrystal model has been adopted, in which the crystallites are considered to be non-uniform, consisting of a uniform crystalline anisotropic core and a uniform isotropic shell. To calculate the effective conductivity of the polycrystal, a generalized effective-field approximation is used, and the effective conductivity of the medium is used as a parameter of the comparison medium, i.e. a method of the self-consistent solution is used. On the basis of the developed method for a case of spherical crystallites with spherical shell the formula for polycrystal effective conductivity depending on the tensor of the crystalline cores, the conductivity of the shell and the volume fraction of the cores in the crystallines, has been obtained. This formula is applied in particular cases of polycrystalline medium, precisely for a polycrystal with single-type crystallites with isotropic core, in which case the expression for effective conductivity coincides with the classical Maxwell – Garnet formula; for polycrystal with the single-type with anisotropic cores with the same orientation of their crystallographic axes in space; for polycrystal with single-type crystallites with anisotropic cores with uniform distribution of orientations of their crystallographic axes in space; for polycrystal with conducting cores of crystallites and absolutely non-conducting shells. In the latter case the effective conductivity of the polycrystal turns to zero conductivity, which is fully consistent with the physical meaning.

Keywords: effective conductivity; polycrystal; crystallite; core; shell; anisotropic; intergranular gaps; generalized effective-field approximation; method of self-consistency

For citation: Lavrov I.V. Method of predicting effective conductivity of textured polycrystals taking into account intergranular gaps *Proc. Univ. Electronics*, 2020, vol. 25, no. 4, pp. 299–309. DOI: 10.24151/1561-5405-2020-25-4-299-309

Funding: the work has been supported by the Russian Foundation for Basic Research (project no. 19-08-00111-a).

Введение. Кристаллиты в реальных поликристаллических материалах отделены друг от друга межзеренным пространством (межкристаллитными промежутками), фактически составляющим отдельную компоненту с иным структурным состоянием атомов по сравнению с кристаллом [1–3]. Вследствие этого материальные характеристики межзеренного пространства, в частности проводимость, отличаются от соответствующих характеристик кристаллитов и зависят от положения рассматриваемой точки внутри образца поликристалла. Наличие межзеренного пространства оказывает влияние на эффективную проводимость поликристалла, причем тем больше, чем меньше размеры кристаллитов. Это объясняется увеличением объемной доли межкристаллитной фазы с уменьшением размеров кристаллов [3].

Вычислению эффективных проводящих, а также диэлектрических, магнитных и теплопроводящих характеристик неоднородных сред посвящено большое количество работ. Математически данные задачи в случае стационарных полей равносильны, поэтому результат решения одной из них можно формально использовать и для других задач при условии совпадения структур рассматриваемых сред. Значительно меньше работ посвящено средам с анизотропными компонентами, среди которых можно отметить, например, [4–22], а также [23–25], где общая теория излагается для случая сред с анизотропными составляющими. Задачи прогнозирования эффективных свойств поликристаллов рассматриваются в [4–8, 16, 19]. Заметим, что во всех литературных источниках межкристаллитные промежутки не учитываются.

В настоящей работе предлагается метод учета влияния межкристаллитных промежутков на эффективную проводимость поликристалла. Метод основан на модели поликристалла с неоднородными кристаллитами, состоящими из однородного кристаллического ядра и однородной изотропной оболочки. В данной модели роль межкристаллитных промежутков играют оболочки кристаллитов и предполагается отсутствие возможной их неоднородности. Для вычисления эффективной проводимости поликристалла используется обобщенное приближение эффективного поля [26] в варианте самосогласования.

Постановка задачи. Рассмотрим образец статистически однородного поликристаллического материала объемом V, к границе S которого приложено однородное электрическое поле напряженностью $\mathbf{E}_0$. Будем считать, что поликристалл состоит из неоднородных и однотипных с точки зрения материальных характеристик и формы кристаллитов, представляющих собой однородное кристаллическое ядро в однородной изотропной оболочке. Границу ядра и внешнюю границу оболочки каждого кристаллита будем считать концентрическими сферами с радиусами $a^{(2)}$ и $a^{(1)}$ соответственно. Проводимость оболочек кристаллитов обозначим σ_s, тензор проводимости ядра конкретного кристаллита в системе координат xyz, связанной с текстурой образца, обозначим $\boldsymbol{\sigma}$ (индекс, указывающий номер кристаллита, будем опускать). В системе координат $\xi\eta\xi$ своих главных осей тензор $\boldsymbol{\sigma}$ имеет вид

$$\tilde{\boldsymbol{\sigma}} = \begin{Vmatrix} \sigma_1 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_2 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_3 \end{Vmatrix}.$$

Ориентации собственных систем координат $\xi\eta\xi$ кристаллитов образца предполагаются распределенными по некоторому вероятностному закону. Ставится задача вычислить тензор эффективной проводимости данного образца поликристалла $\boldsymbol{\sigma}^*$, который определяется уравнением

$$\langle \mathbf{j} \rangle = \boldsymbol{\sigma}^* \langle \mathbf{E} \rangle, \tag{1}$$

где $\langle \mathbf{j} \rangle$ и $\langle \mathbf{E} \rangle$ – соответственно средние по объему образца плотность электрического тока и напряженность электрического поля (предполагается, что среда удовлетворяет гипотезе эргодичности, т.е. среднее по ансамблю реализаций совпадает со средним по объему).

Для того чтобы найти $\boldsymbol{\sigma}^*$, нужно вычислить $\langle \mathbf{j} \rangle$ и $\langle \mathbf{E} \rangle$ в зависимости от параметров, описывающих материальные свойства компонентов поликристалла и структуру, образуемую ими. Для этого рассматривается краевая задача для электростатического потенциала $\varphi(\mathbf{r})$ в данном образце поликристалла:

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{r}) \nabla \varphi(\mathbf{r}) = 0, \quad \varphi|_S = -(\mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{r}), \tag{2}$$

где $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{r})$ – локальный тензор проводимости поликристалла, являющийся случайной кусочно-постоянной функцией точки.

Можно показать, что в рассматриваемых условиях средняя по образцу напряженность электрического поля равна напряженности приложенного поля [5]. Решив задачу (2), можно найти распределения напряженности поля $(\mathbf{E} = -\nabla \varphi)$, а также плотности тока ($\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{r})\mathbf{E}(\mathbf{r})$) в образце в зависимости от напряженности приложенного поля $\mathbf{E}_0$, затем усреднить их по объему и найти $\boldsymbol{\sigma}^*$.

Введение тела сравнения и метод функций Грина. Уравнение в (2) – это уравнение в частных производных второго порядка с разрывными коэффициентами. Для решения этой проблемы используется процедура, связанная с введением однородного тела сравнения, имеющего такую же форму, как и образец поликристалла, и постановкой для него аналогичной задачи [25, 26]:

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}^c(\mathbf{r}) \nabla \varphi^c(\mathbf{r}) = 0, \quad \varphi^c|_S = -(\mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{r}). \tag{3}$$

Здесь индексом «c» отмечены величины, относящиеся к телу сравнения.

Введем обозначения для разностей соответствующих величин в задачах (2) и (3):

$$\varphi'(\mathbf{r}) = \varphi(\mathbf{r}) - \varphi^c(\mathbf{r}), \quad \boldsymbol{\sigma}'(\mathbf{r}) = \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{r}) - \boldsymbol{\sigma}^c.$$

Вычитая (3) из (2), получаем краевую задачу:

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}^c \nabla \varphi'(\mathbf{r}) = -\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}'(\mathbf{r}) \nabla \varphi(\mathbf{r}), \quad \varphi'|_S = 0. \tag{4}$$

В задаче (4) особенность, связанная с разрывностью материальных характеристик на границе между кристаллитами, находится в правой части уравнения, которая формально имеет смысл внешнего воздействия на систему.

С помощью функции Грина $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1)$, вводимой условиями

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}^c \nabla G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1) = -\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1), \quad G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1)|_{\mathbf{r}_1 \in S} = 0,$$

решение задачи (4) в пределе при $V \to \infty$ можно записать в виде [26]

$$\varphi'(\mathbf{r})=\int G(\mathbf{r}_1-\mathbf{r})(\nabla\cdot\boldsymbol{\sigma}'(\mathbf{r}_1)\nabla\varphi(\mathbf{r}_1))\,d\,\mathbf{r}_1\,. \tag{5}$$

Преобразуем (5) по частям и возьмем градиент от левой и правой частей:

$$\mathbf{E}'(\mathbf{r})=\int\nabla^1\otimes\nabla^1 G(\mathbf{r}_1-\mathbf{r})\boldsymbol{\sigma}'(\mathbf{r}_1)\mathbf{E}(\mathbf{r}_1)\,d\,\mathbf{r}_1\,, \tag{6}$$

где $\mathbf{E}'(\mathbf{r})=-\nabla\varphi'(\mathbf{r})$; $\nabla^1\otimes\nabla^1 G(\mathbf{r}_1-\mathbf{r})$ – тензор вторых производных функции Грина (верхний индекс «1» у дифференциального оператора Гамильтона означает дифференцирование по $\mathbf{r}_1$).

Поскольку $\mathbf{E}'(\mathbf{r})=\mathbf{E}(\mathbf{r})-\mathbf{E}^{\mathrm{c}}$, где $\mathbf{E}^{\mathrm{c}}=\mathrm{const}$ – напряженность электрического поля в теле сравнения, из (6) получим интегральное уравнение для локальной напряженности поля:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r})=\mathbf{E}^{\mathrm{c}}+\mathbf{Q}(\mathbf{r})(\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{r})-\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{c}})\mathbf{E}(\mathbf{r}), \tag{7}$$

где $\mathbf{Q}(\mathbf{r})$ – интегральный оператор, действие которого определяет формула

$$\mathbf{Q}(\mathbf{r})\mathbf{f}(\mathbf{r})=\int\nabla^1\otimes\nabla^1 G(\mathbf{r}_1-\mathbf{r})\mathbf{f}(\mathbf{r}_1)\,d\,\mathbf{r}_1.$$

Получение выражения для эффективной проводимости поликристалла в обобщенном приближении эффективного поля. Весь образец поликристалла состоит из конечного числа кристаллитов, количество которых обозначим N. Пусть текущая точка $\mathbf{r}$ лежит внутри k-го кристаллита. Разложим оператор $\mathbf{Q}(\mathbf{r})$ на внешнюю и внутреннюю составляющие по отношению к k-му кристаллиту:

$$\mathbf{Q}(\mathbf{r})=\mathbf{Q}_{ext}^{(k)}(\mathbf{r})+\mathbf{Q}_{int}^{(k)}(\mathbf{r}).$$

Тогда (7) примет вид

$$\mathbf{E}(\mathbf{r})=\mathbf{E}^{\mathrm{c}}+\mathbf{Q}_{ext}^{(k)}(\mathbf{r})(\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{r})-\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{c}})\mathbf{E}(\mathbf{r})+\mathbf{Q}_{int}^{(k)}(\mathbf{r})(\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{r})-\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{c}})\mathbf{E}(\mathbf{r}),\quad \mathbf{r}\in V^{(k)}, \tag{8}$$

где $V^{(k)}$ – объем k-го кристаллита.

Первые два члена в (8) можно назвать напряженностью эффективного поля в данной точке k-го кристаллита, которое формируется в результате приложения к образцу композита внешнего поля и наличия в образце других кристаллитов:

$$\mathbf{E}_{eff}^{(k)}(\mathbf{r})=\mathbf{E}^{\mathrm{c}}+\mathbf{Q}_{ext}^{(k)}(\mathbf{r})(\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{r})-\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{c}})\mathbf{E}(\mathbf{r}),\quad \mathbf{r}\in V^{(k)}.$$

В силу статистической однородности материала и малости каждого включения по сравнению со всем образцом можно принять, что среднее эффективное поле в каждом включении и среднее эффективное поле в образце примерно равны:

$$\langle\mathbf{E}_{eff}\rangle^{(k)}\approx\langle\mathbf{E}_{eff}\rangle,\quad k=\overline{1,N}\,.$$

Другое предположение состоит в том, что средние напряженности поля $\langle\mathbf{E}\rangle_1^{(k)}$, $\langle\mathbf{E}\rangle_2^{(k)}$ в оболочке и ядре каждого кристаллита считаются связанными так же, как если бы данный кристаллит находился в единственном числе в бесконечной среде сравнения с однородным приложенным полем:

$$\langle\mathbf{E}\rangle_1^{(k)}=\boldsymbol{\lambda}_{12}^{(k)}\langle\mathbf{E}\rangle_2^{(k)},\quad k=1,\dots,N\,.$$

В данном случае для сферических однотипных кристаллитов [26]

$$\boldsymbol{\lambda}_{12}^{(k)}=\frac{1}{3\sigma_s}(\boldsymbol{\sigma}^{(k)}+2\sigma_s\mathbf{I}),\quad k=1,\dots,N. \tag{9}$$

Здесь $\boldsymbol{\sigma}^{(k)}$ – тензор проводимости ядра кристаллита, зависящий от ориентации системы координат $\xi\eta\zeta$ его кристаллографических осей в системе координат xyz, связанной с текстурой образца поликристалла:

$$\boldsymbol{\sigma}^{(k)}=\mathbf{C}^{(k)}\tilde{\boldsymbol{\sigma}}\left(\mathbf{C}^{(k)}\right)^T,$$

где $\mathbf{C}^{(k)}$ – матрица поворота от xyz к $\xi\eta\zeta$.

В итоге в обобщенном приближении эффективного поля для $\boldsymbol{\sigma}^*$ получаем следующее выражение [26]:

$$\boldsymbol{\sigma}^*=\langle((1-\nu)\sigma_s\boldsymbol{\lambda}_{12}+\nu\boldsymbol{\sigma})\boldsymbol{\lambda}_{20}\rangle\langle((1-\nu)\boldsymbol{\lambda}_{12}+\nu\mathbf{I})\boldsymbol{\lambda}_{20}\rangle^{-1}, \qquad (10)$$

где $\nu=(a^{(2)}/a^{(1)})^3$ – объемная доля кристаллического ядра в кристаллите; $\boldsymbol{\lambda}_{20}$ – тензор, связанный с конкретным кристаллитом (индекс, обозначающий номер кристаллита, опущен):

$$\boldsymbol{\lambda}_{20}=[(1-\nu)(\mathbf{I}-\mathbf{g}_1(\sigma_s\mathbf{I}-\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{c}}))\boldsymbol{\lambda}_{12}+\nu(\mathbf{I}-\mathbf{g}_1(\boldsymbol{\sigma}-\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{c}}))]^{-1}; \qquad (11)$$

$$\mathbf{g}_1=\int_{V'}\nabla\otimes\nabla G(\mathbf{r})\,d\mathbf{r}.$$

Здесь V' – объем кристаллита, включая его оболочку; $G(\mathbf{r})$– функция Грина задачи (4).

В случае выбора $\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{c}}=\boldsymbol{\sigma}^*$, т.е. при варианте самосогласованного решения, функция $G(\mathbf{r})$ равна [27]:

$$G(\mathbf{r})=\frac{1}{4\pi\sqrt{\det\boldsymbol{\sigma}^*}\sqrt{\mathbf{r}^T(\boldsymbol{\sigma}^*)^{-1}\mathbf{r}}}.$$

Поскольку в системе координат xyz тензор $\boldsymbol{\sigma}^*$ имеет диагональный вид, компоненты тензора $\mathbf{g}_1$ в этой системе могут быть вычислены по формулам [28]

$$g_{1,jj}=-\frac{\tilde{L}_j}{\sigma^*_{jj}},\ j=1,2,3;\quad g_{1,ij}=0,\ i\neq j,$$

где σ^*_{jj}, $j=1, 2, 3$, – главные компоненты тензора $\boldsymbol{\sigma}^*$;

$$\tilde{L}_j=\frac{\tilde{a}_1\tilde{a}_2\tilde{a}_3}{2}\int_0^\infty\frac{dq}{(\tilde{a}_j^2+q)[(\tilde{a}_1^2+q)(\tilde{a}_2^2+q)(\tilde{a}_3^2+q)]^{1/2}},\quad j=1,2,3, -$$

главные компоненты тензора обобщенных геометрических факторов кристаллита с учетом анизотропии среды сравнения; $\tilde{a}_j=a^{(1)}/\sqrt{\sigma^*_{jj}}$, $j=1,2,3,$ – «обобщенные» полуоси сферы с учетом анизотропии среды сравнения.

Введем тензоры $\boldsymbol{\lambda}$ и $\boldsymbol{\kappa}$, связанные с данным кристаллитом:

$$\boldsymbol{\lambda}=((1-\nu)\boldsymbol{\lambda}_{12}+\nu\mathbf{I})\boldsymbol{\lambda}_{20},\quad \boldsymbol{\kappa}=((1-\nu)\sigma_s\boldsymbol{\lambda}_{12}+\nu\boldsymbol{\sigma})\boldsymbol{\lambda}_{20}. \qquad (12)$$

Тогда (10) можно переписать в виде

$$\boldsymbol{\sigma}^*=\langle\boldsymbol{\kappa}\rangle\langle\boldsymbol{\lambda}\rangle^{-1}, \qquad (13)$$

где угловые скобки означают усреднение по всем кристаллитам образца, но поскольку в данном случае кристаллиты отличаются только ориентациями их кристаллографических осей в системе координат xyz, то усреднение в (13) – это усреднение по всем ориентациям кристаллитов образца в системе xyz.

Выражение (13) представляет собой тензорное уравнение, которое достаточно эффективно решается методом простых итераций [29].

Применение метода для некоторых частных случаев поликристаллов. *Пример 1.* В случае изотропного ядра кристаллитов, т.е. при $\boldsymbol{\sigma} = \sigma\mathbf{I}$, поликристалл в целом изотропен $(\boldsymbol{\sigma}^* = \sigma^*\mathbf{I})$. Тогда все тензорные величины, связанные с кристаллитами, изотропны и одинаковы для всех кристаллитов:

$$\widetilde{L}_j = \frac{1}{3},\ j = 1,2,3,\quad \mathbf{g}_1 = -\frac{1}{3\sigma^*}\mathbf{I},\quad \boldsymbol{\lambda}_{12} = \frac{\sigma + 2\sigma_s}{3\sigma_s}\mathbf{I},$$

$$\boldsymbol{\lambda}_{20} = \left[(1-\nu)\frac{\sigma_s + 2\sigma^*}{3\sigma^*}\frac{\sigma + 2\sigma_s}{3\sigma_s} + \nu\frac{\sigma + 2\sigma^*}{3\sigma^*}\right]^{-1}\mathbf{I}, \tag{14}$$

$$\boldsymbol{\lambda} = \frac{\sigma + 2\sigma_s + \nu(\sigma_s - \sigma)}{3\sigma_s}\boldsymbol{\lambda}_{20},\quad \boldsymbol{\kappa} = \frac{\sigma + 2\sigma_s + 2\nu(\sigma - \sigma_s)}{3}\boldsymbol{\lambda}_{20}.$$

Для $\boldsymbol{\sigma}^*$ из (13) с учетом (14) получим классическую формулу Максвелла – Гарнетта [5, 10, 15], где роль матрицы играет материал оболочки кристаллитов:

$$\boldsymbol{\sigma}^* = \boldsymbol{\kappa}\boldsymbol{\lambda}^{-1} = \sigma_s\frac{\sigma + 2\sigma_s + 2\nu(\sigma - \sigma_s)}{\sigma + 2\sigma_s - \nu(\sigma - \sigma_s)}. \tag{15}$$

Пример 2. Рассмотрим случай, когда ядра кристаллитов анизотропные, но главные оси тензоров их проводимости $\boldsymbol{\sigma}$ ориентированы одинаковым образом. Тогда

$$\boldsymbol{\sigma}^* = \boldsymbol{\kappa}\boldsymbol{\lambda}^{-1} = \left((1-\nu)\sigma_s\boldsymbol{\lambda}_{12} + \nu\widetilde{\boldsymbol{\sigma}}\right)\left((1-\nu)\boldsymbol{\lambda}_{12} + \nu\mathbf{I}\right)^{-1}$$

и с учетом того, что

$$\boldsymbol{\lambda}_{12} = \frac{1}{3\sigma_s}(\widetilde{\boldsymbol{\sigma}} + 2\sigma_s\mathbf{I}),$$

окончательно получим

$$\boldsymbol{\sigma}^* = \boldsymbol{\kappa}\boldsymbol{\lambda}^{-1} = \sigma_s\left(\widetilde{\boldsymbol{\sigma}} + 2\sigma_s\mathbf{I} + 2\nu(\widetilde{\boldsymbol{\sigma}} - \sigma_s\mathbf{I})\right)\left(\widetilde{\boldsymbol{\sigma}} + 2\sigma_s\mathbf{I} - \nu(\widetilde{\boldsymbol{\sigma}} - \sigma_s\mathbf{I})\right)^{-1}. \tag{16}$$

Все тензорные величины, входящие в (16), имеют диагональный вид в системе *xyz*, поэтому главные компоненты тензора $\boldsymbol{\sigma}^*$ получаются заменой тензорных величин в (16) на соответствующие их главные компоненты.

Следует отметить, что в рассмотренных примерах результат не зависит от выбора параметра среды сравнения $\boldsymbol{\sigma}^c$ (в обоих случаях он выбирался равным $\boldsymbol{\sigma}^*$, но входил только в выражение для $\boldsymbol{\lambda}_{20}$, который в процессе преобразований сокращался).

Пример 3. Рассмотрим случай с анизотропными ядрами кристаллитов при равномерном распределении их ориентаций в пространстве. В этом случае тензор эффективной проводимости поликристалла имеет скалярный вид: $\boldsymbol{\sigma}^* = \sigma^*\mathbf{I}$. Так же, как и в примере 1, имеем

$$\mathbf{g}_1 = -\frac{1}{3\sigma^*}\mathbf{I}.$$

Согласно (9), (11), (12) получим

$$\boldsymbol{\lambda}_{20}=3\sigma^{*}\left[(1-\nu)\frac{\sigma_s+2\sigma^{*}}{3\sigma_s^{*}}(\boldsymbol{\sigma}+2\sigma_s\mathbf{I})+\nu(\boldsymbol{\sigma}+2\sigma^{*}\mathbf{I})\right]^{-1},$$

$$\boldsymbol{\lambda}=\frac{1}{3\sigma_s}((\boldsymbol{\sigma}+2\sigma_s\mathbf{I})-\nu(\boldsymbol{\sigma}-\sigma_s\mathbf{I}))\boldsymbol{\lambda}_{20}, \tag{17}$$

$$\boldsymbol{\kappa}=\frac{1}{3}((\boldsymbol{\sigma}+2\sigma_s\mathbf{I})+2\nu(\boldsymbol{\sigma}-\sigma_s\mathbf{I}))\boldsymbol{\lambda}_{20}.$$

В системе координат $\xi\eta\zeta$ собственных осей кристаллита данные тензоры имеют диагональный вид с главными компонентами:

$$\lambda'_{20,j}=3\sigma^{*}\left[(1-\nu)\frac{\sigma_s+2\sigma^{*}}{3\sigma_s}(\sigma_j+2\sigma_s)+\nu(\sigma_j+2\sigma^{*})\right]^{-1}, \quad j=1,2,3,$$

$$\lambda'_j=\frac{1}{3\sigma_s}((\sigma_j+2\sigma_s)-\nu(\sigma_j-\sigma_s))\lambda'_{20,j}, \tag{18}$$

$$\kappa'_j=\frac{1}{3}((\sigma_j+2\sigma_s)+2\nu(\sigma_j-\sigma_s))\lambda'_{20,j}, \quad j=1,2,3,$$

где σ_j, j = 1, 2, 3, – главные компоненты тензора $\boldsymbol{\sigma}$.

При равномерном распределении ориентаций кристаллитов для усредненных компонент тензоров $\boldsymbol{\lambda}$ и $\boldsymbol{\kappa}$ в системе xyz получаем [30]

$$\langle\lambda_{jj}\rangle=D/3, \quad j=1,2,3; \quad \langle\lambda_{ij}\rangle=0,\ i\neq j, \tag{19}$$

$$\langle\kappa_{jj}\rangle=K/3, \quad j=1,2,3; \quad \langle\kappa_{ij}\rangle=0,\ i\neq j,$$

где

$$D=\lambda'_1+\lambda'_2+\lambda'_3, \quad K=\kappa'_1+\kappa'_2+\kappa'_3. \tag{20}$$

Таким образом, для эффективной проводимости поликристалла в случае равномерного распределения ориентаций кристаллитов уравнение имеет вид

$$\sigma^{*}=\frac{\kappa'_1+\kappa'_2+\kappa'_3}{\lambda'_1+\lambda'_2+\lambda'_3}, \tag{21}$$

где λ'_j, κ'_j вычисляются из (18).

Несложно убедиться, что в частном случае изотропных ядер кристаллитов уравнение (21) становится равносильным выражению (15).

Пример 4. Рассмотрим предельный случай, когда кристаллические ядра у кристаллитов проводящие, а межкристаллитная фаза в поликристалле абсолютно непроводящая, т.е. при $\sigma_s = 0$. При $\sigma_s\to 0$ из (9), (11), (12) имеем

$$\boldsymbol{\lambda}_{12}\sim\frac{\boldsymbol{\sigma}}{3\sigma_s}, \quad \boldsymbol{\lambda}_{20}\sim\sigma_s\left[(1-\nu)(\mathbf{I}+\mathbf{g}_1\boldsymbol{\sigma}^{c})\frac{\boldsymbol{\sigma}}{3}\right]^{-1},$$

$$\boldsymbol{\lambda}\sim(\mathbf{I}+\mathbf{g}_1\boldsymbol{\sigma}^{c})^{-1}, \quad \boldsymbol{\kappa}\sim\sigma_s(1+2\nu)\left[(1-\nu)(\mathbf{I}+\mathbf{g}_1\boldsymbol{\sigma}^{c})\right]^{-1}.$$

Тогда

$$\boldsymbol{\sigma}^{*} \sim \sigma_s (1+2\nu)\left[(1-\nu)(\mathbf{I}+\mathbf{g}_1\boldsymbol{\sigma}^{c})\right]^{-1}(\mathbf{I}+\mathbf{g}_1\boldsymbol{\sigma}^{c}) \to 0, \quad \sigma_s \to 0. \tag{22}$$

Таким образом, данный метод дает верный результат в предельном случае непроводящей межкристаллитной фазы.

Заключение. С помощью разработанного метода прогнозирования эффективной проводимости поликристалла с учетом межкристаллитных промежутков получена общая формула для тензора эффективной проводимости поликристаллической среды.

Получены выражения для тензора эффективной проводимости для частных случаев поликристаллов. Установлено, что в частном случае непроводящих межкристаллитных промежутков и проводящих ядер кристаллитов эффективная проводимость поликристалла обращается в нуль.

Литература

1. ***Gleiter H.*** Deformation of polycrystals // Proc. of 2nd RISO Symposium on Metallurgy and Materials Science / Eds. by N. Hansen, T. Leffers, H. Lithold. Roskild, RISO Nat. Lab. 1981. P. 15–21.
2. ***Gleiter H.*** Nanostructured materials: basic concepts and microstructure // Acta Mater. 2000. Vol. 48. No. P. 1–29.
3. ***Яковлев В.Б., Рощин В.М.*** Нанокомпозиты и нанокерамики как основа функциональной электроники // Нанотехнологии в электронике: монография / под ред. Ю.А. Чаплыгина. М.: Техносфера, 2005. Гл. 9. С. 323–360.
4. ***Hashin Z., Shtrikman S.*** Conductivity of polycrystals // Phys. Rev. 1963. Vol. 130. P. 129–133.
5. ***Stroud D.*** Generalized effective-medium approach to the conductivity of an inhomogeneous material // Phys. Rev. B. 1975. Vol. 12. No. 8. P. 3368–3373.
6. ***Ting-Kang Xia, Stroud D.*** Theory of the Hall coefficients of polycrystals: application to a simple model for $La_{2-x}M_xCuO_4$ (M=Sr, Ba) // Phys. Rev. B. 1988. Vol. 37. No. 1. P. 118–122.
7. ***Helsing J., Helte A.*** Effective conductivity of aggregates of anisotropic grains // J. Appl. Phys. 1991. Vol. 69. No. 6. P. 3583–3588.
8. ***Genchev Z.D.*** Anisotropic electrical conductivity tensor of granular high- T_c superconductors in an effective-medium theory // Supercond. Sci. Technol. 1993. Vol. 6. P. 532–536.
9. ***Dias-Guilera A., Tremblay A.-M. S.*** Random mixtures with orientational order, and the anisotropic resistivity tensor of high-Tc superconductors // J. Appl. Phys. 1991. Vol. 69. No. 1. P.379–383.
10. ***Levy O., Stroud D.*** Maxwell – Garnett theory for mixtures of anisotropic inclusions: Application to conducting polymers // Phys. Rev. B. 1997. Vol. 56. No. 13. P. 8035–8046.
11. ***Michel B., Lakhtakia A., Weiglhofer W.*** Homogenization of linear bianisotropic particulate composite media - Numerical studies // Int. J. of Applied Electromagnetics and Mechanics. 1998. Vol. 9. P. 167–178.
12. ***Bergman D.J., Strelniker Y.M.*** Magnetotransport in conducting composite films with a disordered columnar microstructure and an in-plane magnetic field // Phys. Rev. B. 1999. Vol. 60. No. 18. P. 13016–13027.
13. ***Giordano S.*** Equivalent permittivity tensor in anisotropic random media / J. Electrost. 2006. Vol. 64. P. 655–663.
14. ***MacKay T.G.*** On extended homogenization formalisms for nanocomposites // J. of Nanophotonics. 2008. Vol. 2. 021850 (10 pp). DOI: 10.1117/1.2982931
15. ***Лавров И.В.*** Диэлектрическая проницаемость композиционных материалов с текстурой: эллипсоидальные анизотропные кристаллиты // Экологический вестник научных центров Черноморского экономического сотрудничества. 2009. № 1. С. 52–58.
16. ***Лавров И.В.*** Эффективная проводимость поликристаллической среды. Одноосная текстура и двуосные кристаллиты // Изв. вузов. Электроника. 2010. №3. С. 3–12.
17. ***Балагуров Б.Я.*** К теории проводимости анизотропных композитов. Линейное по концентрации включений приближение // ЖЭТФ. 2011. Т. 140. №5(11). С. 976–983.
18. ***Балагуров Б.Я.*** К теории проводимости анизотропных композитов. Слабонеоднородная среда // ЖЭТФ. 2011. Т. 139. Вып. 2. С. 378–383.

19. ***Лавров И.В.*** Эффективная проводимость поликристаллической среды в случае слабой макроскопической анизотропии // Изв. вузов. Электроника. 2012. №4. С. 3–12.

20. ***Levy O., Cherkaev E.*** Effective medium approximations for anisotropic composites with arbitrary component orientation // J. Appl. Phys. 2013. Vol. 114. 164102 (8 pp.) DOI: 10.1063/1.4826616

21. ***Балагуров Б.Я.*** К теории гальваномагнитных свойств композитов // ЖЭТФ. 2014. Т. 145. № 2. С. 356–368.

22. ***Giordano S.*** Nonlinear effective behavior of a dispersion of randomly oriented coated ellipsoids with arbitrary temporal dispersion // Int. J. Eng. Science. 2016. Vol. 98. P. 14–35.

23. ***Фокин А.Г.*** О границах для эффективной диэлектрической проницаемости неоднородных материалов // ЖТФ. 1973. Т. 43. Вып. 1. С. 71–77.

24. ***Фокин А.Г.*** Эквивалентность методов расчета эффективной диэлектрической проницаемости неоднородных сред // ЖТФ. 1977. Т. 47. Вып. 6. С. 1121–1126.

25. ***Фокин А.Г.*** Макроскопическая проводимость случайно-неоднородных сред. Методы расчета // УФН. 1996. Т. 166. № 10. С. 1069–1093.

26. Обобщенное приближение эффективного поля для неоднородной среды с включениями в оболочке / ***В.И. Колесников, В.В. Бардушкин, И.В. Лавров и др.*** // Докл. Академии наук. 2017. Т. 476. №3. С. 280–284. DOI: 10.7868/S0869565217270081

27. ***Giordano S., Palla P.L.*** Dielectric behavior of anisotropic inhomogeneities: interior and exterior point Eshelby tensors // J. Phys. A: Math. Theor. 2008. Vol. 41. 415205 (24 pp).

28. О вычислении эффективной теплопроводности текстурированных трибокомпозитов / ***И.В. Лавров, В.В. Бардушкин, А.П. Сычев и др.*** // Экологический вестник научных центров Черноморского экономического сотрудничества. 2017. № 2. С. 48–56.

29. ***Березин И.С., Жидков Н.П.*** Методы вычислений. М.: ГИФМЛ, 1962. Т. 2. 640 с.

30. ***Лавров И.*** Диэлектрические и проводящие свойства неоднородных сред с текстурой. Saarbrücken: LAP Lambert Academic Publishing, 2011. 168 с.

Поступила в редакцию 18.02.2020 г.; после доработки 18.02.2020 г.; принята к публикации 16.06.2020 г.

Лавров Игорь Викторович – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры высшей математики № 2 Национального исследовательского университета «МИЭТ» (Россия, 124498, г. Москва, г. Зеленоград, пл. Шокина, 1), iglavr@mail.ru

References

1. Gleiter H. Deformation of Polycrystals. *Proc. of 2nd RISO Symposium on Metallurgy and Materials Science.* Eds. N. Hansen, T. Leffers, H. Lithold. Roskild, RISO Nat. Lab. 1981, pp. 15–21.

2. Gleiter H. Nanostructured materials: basic concepts and microstructure. *Acta Mater*, 2000, vol. 48, no. 1, pp. 1–29.

3. Yakovlev V.B., Roshin V.M. *Nanocomposites and nanoceramics as the basis of functional electronics.* Chapter 9 of collective monography «Nanotechnologies in electronics». Ed. by Y.A. Chaplygin. Moscow, Tekhnosfera Publ., 2005, pp. 323–360. (In Russian).

4. Hashin Z., Shtrikman S. Conductivity of polycrystals. *Phys. Rev.,* 1963, vol. 130, pp. 129–133.

5. Stroud D. Generalized effective-medium approach to the conductivity of an inhomogeneous material. *Phys. Rev. B*, 1975, vol. 12, no. 8, pp. 3368–3373.

6. Ting-Kang Xia, Stroud D. Theory of the Hall coefficients of polycrystals: Application to a Simple Model for $La_{2-x}M_xCuO_4$ (M=Sr, Ba). *Phys. Rev. B*, 1988, vol. 37, no. 1, pp. 118–122.

7. Helsing J., Helte A. Effective conductivity of aggregates of anisotropic grains. *J. Appl. Phys.*, 1991, vol. 69, no. 6, pp. 3583–3588.

8. Genchev Z.D. Anisotropic electrical conductivity tensor of granular high- Tc superconductors in an effective-medium theory. *Supercond. Sci. Technol.*, 1993, vol. 6, pp. 532–536.

9. Dias-Guilera A., Tremblay A.-M.S. Random mixtures with orientational order, and the anisotropic resistivity tensor of high-Tc superconductors. *J. Appl. Phys.*, 1991, vol. 69, no. 1, pp. 379–383.

10. Levy O., Stroud D. Maxwell Garnett theory for mixtures of anisotropic inclusions: Application to conducting polymers. *Phys. Rev. B,* 1997, vol. 56, no. 13, pp. 8035–8046.

11. Michel B., Lakhtakia A., Weiglhofer W. Homogenization of linear bianisotropic particulate composite media - Numerical studies. *Int. J. of Applied Electromagnetics and Mechanics*, 1998, vol. 9, pp. 167–178.

12. Bergman D.J., Strelniker Y.M. Magnetotransport in conducting composite films with a disordered columnar microstructure and an in-plane magnetic field. *Phys. Rev. B*, 1999, vol. 60, no. 18, pp. 13016–13027.

13. Giordano S. Equivalent permittivity tensor in anisotropic random media. *J. Electrost*., 2006, vol. 64, pp. 655–663.

14. MacKay T.G. On extended homogenization formalisms for nanocomposites. *J.of Nanophotonics,* 2008, vol. 2, p. 021850 (10 pp). DOI: 10.1117/1.2982931

15. Lavrov I.V. Permittivity of composite materials with texture: ellipsoidal anisotropic crystallites. *Ekologicheskij vestnik nauchnyh centrov Chernomorskogo ekonomicheskogo sotrudnichestva = Ecological Bulletin of Research Centers of the Black Sea Economic Cooperation*, 2009, no. 1, pp. 52–58. (In Russian).

16. Lavrov I.V. Effective conductivity of a polycrystalline medium. uniaxial texture and biaxial crystallites. *Semiconductors*, 2011, vol. 45, no. 13, pp. 1621–1627. DOI: 10.1134/S106378261113015X

17. Balagurov B.Y. On the theory of conductivity of anisotropic composites: A linear-concentration approximation of inclusions. *J. Exp. Theor. Phys.,* 2011, vol. 113, pp. 849–856. DOI: https://doi.org/10.1134/S1063776111090020

18. Balagurov B.Y. On the theory of conductivity of anisotropic composites: A weakly inhomogeneous medium. *J. Exp. Theor. Phys.,* 2011, vol. 112, pp. 327–332. DOI: https://doi.org/10.1134/S1063776111020026

19. Lavrov I.V. Effective conductivity of a polycrystalline medium with weak macroscopic anisotropy. *Semiconductors*, 2013, vol. 47, no. 13, pp. 1667–1673. DOI: 10.1134/S1063782613130113

20. Levy O., Cherkaev E. Effective medium approximations for anisotropic composites with arbitrary component orientation. *J. Appl. Phys.,* 2013, vol. 114, p. 164102. (8 pp.) DOI: 10.1063/1.4826616

21. Balagurov B.Y. On the theory of galvanomagnetic properties of composites. *J. Exp. Theor. Phys.,* 2014, vol. 118, pp. 311–322. https://doi.org/10.1134/S1063776114020010)

22. Giordano S. Nonlinear effective behavior of a dispersion of randomly oriented coated ellipsoids with arbitrary temporal dispersion. *Int. J. Eng. Science,* 2016, vol. 98, pp. 14–35.

23. Fokin A.G. On bounds for the effective permittivity of inhomogeneous materials, *Soviet Physics: Technical Physics*, 1973, vol. 18, p. 44.

24. Fokin A.G. Equivalence of the calculation methods of the effective permittivity of inhomogeneous media. *Soviet Physics: Technical Physics*, 1977, vol. 22, p. 645.

25. Fokin A.G. Macroscopic conductivity of random inhomogeneous media. Calculation methods. *Physics Uspekhi*. 1996, vol. 39, pp. 1009–1032.

26. Kolesnikov V.I., Bardushkin V.V., Lavrov I.V., Sychev A.P., Yakovlev V.B.. A Generalized effective-field approximation for an inhomogeneous medium with coated inclusions. *Dokl. Phys.,* 2017, vol. 62, no. 9, pp. 415–419. DOI: 10.1134/S1028335817090087

27. Giordano S., Palla P.L. Dielectric behavior of anisotropic inhomogeneities: interior and exterior point Eshelby tensors. *J. Phys. A: Math. Theor*., 2008, vol. 41, p. 415205 (24 pp.).

28. Lavrov I.V., Bardushkin V.V., Sychev A.P., Yakovlev V.B., Kirillov D.A. On calculation of the effective thermal conductivity of textured tribocomposites. *Ekologicheskij vestnik nauchnyh centrov Chernomorskogo ekonomicheskogo sotrudnichestva = Ecological Bulletin of Research Centers of the Black Sea Economic Cooperation*, 2017, no. 2, pp. 48–56. (In Russian).

29. Berezin I.S., Zhidkov N.P. *Methods of calculation*. Moscow, State Publishing of Physical and Mathematical Literature, 1962, vol. 2. 640 p. (In Russian).

30. Lavrov I. *Dielectrical and conducting properties of inhomogeneous media with texture.* Saarbrücken, LAP Lambert Academic Publishing, 2011. 168 p. (In Russian).

Received 18.02.2020; Revised 18.02.2020; Accepted 16.06.2020.

Information about the author:

Igor V. Lavrov – Cand. Sci. (Phys.-Math.), Assoc. Prof. of the High Mathematics-2 Department, National Research University of Electronic Technology (Russia, 124498, Moscow, Zelenograd, Shokin sq., 1), iglavr@mail.ru