Физика низких температур, 1996, т. 22, № 8, с. 929–942

# Скин-эффект в поликристаллах

И. М. Каганова

*Институт физики высоких давлений РАН, Россия, 142092, Московская обл., г. Троицк*
E-mail: litin@ns.hppi.troitsk.ru

М. И. Каганов

*Agassiz ave. 7, Belmont, MA 02178 USA*

Статья поступила в редакцию 19 февраля 1996 г.

**В предположении о слабой анизотропии тензора проводимости монокристалла, из зерен которого состоит поликристалл, вычислен эффективный импеданс поликристаллического металла в условиях аномального скин-эффекта в случае, когда средний размер кристаллита больше длины свободного пробега электронов проводимости. Расчет проводился в рамках теории возмущений. Использовался метод Фурье, позволивший избежать вычисления случайных полей в r-представлении. Методом Фурье воспроизведены полученные ранее выражения для эффективного импеданса поликристаллического металла в условиях нормального скин-эффекта. Предлагаемая схема расчета позволяет вычислять эффективный импеданс поликристаллов для широкого класса металлов в большом интервале параметров. В условиях аномального скин-эффекта численная оценка эффективного импеданса выполнена для простой модели квадратичного закона дисперсии электронов проводимости исходного монокристалла.**

**В припущенні про слабку анізотропію тензора провідності монокристала, із зерен якого складається полікристал, обчислено ефективний імпеданс полікристалічного металу в умовах аномального скін-ефекту у випадку, коли середній розмір кристаліта більше довжини вільного пробігу електронів провідності. Розрахунок проведено в межах теорії збурень. Використано метод Фур'є, який дозволив уникнути обчислення випадкових полів у r-зображенні. За допомогою методу Фур'є відтворено раніше одержані вирази для ефективного імпеданса полікристалічного металу в умовах нормального скін-ефекту. Запропонована схема розрахунку дозволяє обчислювати ефективний імпеданс полікристалів для широкого класу металів у великому інтервалі параметрів. В умовах аномального скін-ефекту чисельну оцінку ефективного імпеданса виконано для простої моделі квадратичного закону дисперсії електронів провідності початкового монокристала.**

## 1. Введение

Вычисление физических характеристик поликристаллов до настоящего времени остается актуальной задачей [1–9]. Свойства поликристаллов зависят как от их макроскопической структуры (отсутствует или наличествует текстура, каковы размеры кристаллитов, характер межкристаллитных прослоек и т.п.), так и от свойств отдельных кристаллитов. Эта работа, как и предыдущие [7,8], ставит своей задачей вычисление электродинамических характеристик поликристаллического металла без текстуры по соответствующим характеристикам монокристаллических зерен, из которых он состоит. Зерна в среднем идентичны и отличаются только направлением кристаллографических осей. Детальное описание принятых статистических свойств поликристаллов имеется в [6] (см. также ниже).

Естественным нулевым приближением любой макроскопической характеристики $\psi$ поликристалла может служить осредненное по всевозможным направлениям кристаллографических осей значение $\overline{\psi}$ соответствующей характеристики монокристалла. Однако чем более анизотропна характеристика $\psi$, тем менее точно осредненная характеристика $\overline{\psi}$ соответствует ее истинному значению для поликристалла. При вычислении $\overline{\psi}$ полностью не учитываются пространственные флуктуации характеристики $\psi$, обусловленные разориентацией кристаллографических осей соседних кристаллитов. Эти флуктуационные поправки зависят не только от значения характеристики $\psi$ в монокристалле, но и от того, какое явление описывается данной характеристикой [6–9]. Задача состоит в вычислении эффективного значения $\psi^{\text{eff}}$, адекватно описывающего данное явление.

В общем случае произвольной анизотропии характеристики $\psi$ эта задача для поликристалла не решена до сих пор. Известны работы Дыхне с соавторами [10,11], в которых вычислена средняя про-

© И. М. Каганова, М. И. Каганов, 1996

водимость поликристаллического образца (в [10] — двумерного, в [11] — трехмерного). Существует регулярный метод теории возмущений (МТВ). Он эффективен тогда, когда анизотропия характеристики мала и при вычислении флуктуационных поправок можно ограничиться первым неисчезающим приближением. В пионерских работах Лифшица с сотрудниками [1–3] МТВ использовался при расчете свойств неограниченных поликристаллов.

По-видимому, первой работой, в которой метод Лифшица был использован в ситуации, где необходим учет поверхности образца, является работа [6]. В ней вычислен закон дисперсии поверхностных рэлеевских волн в поликристалле, зерна которого имеют произвольную кристаллографическую симметрию с малой акустической анизотропией. Кроме того, в этом плане мы хотим обратить внимание на цитированные работы [7,8], а также на работу [9], в которой рассмотрены свойства поверхностного поляритона на границе поликристалл–вакуум.

Метод теорий возмущений требует вычисления случайных полей, и именно поэтому решение задачи для неограниченного пространства проще, чем для полупространства. В первом случае задача может быть сведена к алгебраической, а во втором — требует решения соответствующего интегрального уравнения (см. разд. 4).

Основная цель настоящей работы — вычисление эффективного импеданса поликристаллического металла в условиях аномального скин-эффекта [12] (длина свободного пробега электронов $l$ значительно превышает глубину скин-слоя $\delta$). При расчете предполагалось, что $l$ значительно меньше среднего размера кристаллита. Расчет выполнен с помощью МТВ в предположении о слабой анизотропии тензора проводимости монокристалла, из зерен которого состоит данный поликристалл. Вычисления удается довести «до числа» для простой модели квадратичного закона дисперсии электронов проводимости. Использован метод Фурье (см. разд. 4), значительно облегчающий вычисления и позволяющий избежать решения уравнений в r-представлении.

Импеданс поликристаллического металла в условиях нормального скин-эффекта рассчитывался ранее в работах [7,8]. Ниже мы воспроизведем эти результаты в рамках метода Фурье. Их совпадение позволяет убедиться в применимости метода Фурье к поликристаллам. Предлагаемая процедура расчета позволяет в рамках единой схемы вычислить эффективный импеданс поликристаллического металла для широкого интервала параметров (температуры, частоты падающей волны).

В нашей модели поликристалл в среднем изотропен. Мы определяем эффективный импеданс $\gamma^{\text{eff}}$ как коэффициент, связывающий средние тангенциальные напряженности электрического $\langle \mathbf{E}_t \rangle$ и магнитного $\langle \mathbf{H}_t \rangle$ полей на поверхности металла:

$$\langle \mathbf{E}_t \rangle = \gamma^{\text{eff}} [\, \langle \mathbf{H}_t \rangle \mathbf{n} \,] \; ; \quad \mathbf{n} = (0, 0, 1) \; , \qquad (1)$$

здесь $\mathbf{n}$ — нормаль к поверхности металла; угловые скобки $\langle \ldots \rangle$ означают усреднение по всем реализациям данной поликристаллической структуры. (Напомним, на границе монокристаллического тела напряженности $\mathbf{E}_t$ и $\mathbf{H}_t$ связаны тензором поверхностных импедансов $\gamma_{\alpha\beta}$; $\alpha, \beta = 1, 2$. В изотропном теле этот тензор вырождается в скаляр $\gamma_{\alpha\beta} = \gamma\delta_{\alpha\beta}$.)

## 2. Общая схема решения задачи в r-представлении

Для вычисления импеданса необходимо рассмотреть нормальное падение электромагнитной волны на поверхность металла. Естественно, электромагнитное поле частоты $\omega$ удовлетворяет уравнениям Максвелла:

1) в проводнике ($x_3 > 0$)

$$\operatorname{rot} \mathbf{H} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j} \; ; \quad \operatorname{rot} \mathbf{E} = \frac{i\omega}{c} \mathbf{H} \; , \qquad (2)$$

где $\mathbf{j}$ — плотность тока;

2) в вакууме ($x_3 < 0$)

$$\operatorname{rot} \mathbf{H} = -\frac{i\omega}{c} \mathbf{E} \; ; \quad \operatorname{rot} \mathbf{E} = \frac{i\omega}{c} \mathbf{H} \; . \qquad (3)$$

Граничные условия к этим уравнениям требуют непрерывности тангенциальных компонент поля на поверхности проводника ($x_3 = 0$); поля затухают вглубь проводника ($x_3 \to +\infty$); отраженная волна либо уходит от поверхности $x_3 = 0$ ($x_3 \to -\infty$), либо затухает вблизи этой поверхности. Дополнительное граничное условие, означающее невылет электронов из металла, требует обращения в нуль нормального тока на поверхности $x_3 = 0$:

$$j_3(x_3 = 0) = 0 \; . \qquad (4)$$

К этим уравнениям надо добавить материальное уравнение, связывающее плотность тока $\mathbf{j}$ с напряженностью электрического поля $\mathbf{E}$. Предполагая рассмотреть случай низких температур и достаточно чистых металлов, когда длина свободного пробега электронов $l$ может значительно превы-

шать глубину скин-слоя $\delta$ (аномальный скин-эффект), воспользуемся кинетическим описанием.

Когда речь идет о поликристалле, применимость кинетического подхода требует разъяснения. На этом вопросе остановимся ниже (см. разд. 3). При описании общей схемы решения задачи для нас существенно только то, что в общем случае плотность тока $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ связана с $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ интегральным соотношением

$$j_i = \hat{\sigma}_{ik}\{E_k\}\,, \qquad (5)$$

где $\hat{\sigma}_{ik}$ — матрица линейных интегральных операторов (интегрирование ведется по r-пространству; фигурные скобки подчеркивают: $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ — функционал от $\mathbf{E}(\mathbf{r})$).

В случае поликристалла тензор проводимости $\hat{\sigma}_{ik}$ — случайный оператор: пересекая границу между соседними кристаллитами электромагнитная волна эффективно переходит из одной анизотропной среды в другую. Выделим из $\hat{\sigma}_{ik}$ его осредненное по всевозможным ориентациям кристаллографических осей значение $\overline{\hat{\sigma}_{ik}}$ и введем случайный оператор $\delta\hat{\sigma}_{ik}$, обращающийся в нуль вместе с анизотропией и при осреднении:

$$\hat{\sigma}_{ik} = \overline{\hat{\sigma}_{ik}} + \delta\hat{\sigma}_{ik}\,; \quad \overline{\delta\hat{\sigma}_{ik}} = 0\,. \qquad (6)$$

Из-за наличия случайного тензора в правой части уравнения (2) поля в проводнике и в отраженной волне являются случайными. Выделим из них средние значения

$$\mathbf{E} = \langle\mathbf{E}\rangle + \delta\mathbf{E}\,. \qquad (7)$$

Подставим (6) и (7) в уравнение (5) и учтем, что $\hat{\sigma}_{ik}$ — линейный оператор. Усредним полученное выражение и представим

$$j_i = \langle j_i(\mathbf{r})\rangle + \delta j_i(\mathbf{r})\,, \qquad (8)$$

где

$$\langle j_i(\mathbf{r})\rangle = \overline{\hat{\sigma}_{ik}}\{\langle E_k\rangle\} + \langle\overline{\delta\hat{\sigma}_{ik}}\{\delta E_k\}\rangle\,; \qquad (8а)$$

второе слагаемое в этом уравнении — добавка к средней плотности тока, обязанная флуктуациям оператора проводимости. В пренебрежении квадратичными членами плотность случайного тока есть

$$\delta j_i(\mathbf{r}) = \overline{\hat{\sigma}_{ik}}\{\delta E_k\} + \delta\hat{\sigma}_{ik}\{\langle E_k\rangle\}\,. \qquad (8б)$$

При последовательном решении задачи встречается определенная трудность, на которую следует обратить внимание. Существование флуктуационного электрического поля $\delta\mathbf{E}$ и случайной плотности тока $\delta\mathbf{j}$ затрудняют выполнение граничного условия (4), дополнительного к электродинамическим граничным условиям. В [8] показано, что недоразумение разрешается введением плотности заряда $\rho'$ и продольного электрического поля $\mathbf{E}_l$, исчезающих на расстоянии порядка $r_e$, где $r_e$ — радиус Дебай—Хюккеля электронов проводимости. Так как $r_e \le d$ ($d$ — межатомное расстояние), то при решении макроскопических задач о «неприятности», связанной с нормальной компонентой случайного тока на поверхности образца, можно не думать.

Выпишем уравнения для средних полей и обсудим поэтапную схему решения задачи в r-представлении. Ограничимся записью уравнений Максвелла (2) в проводнике ($x_3 > 0$), имея в виду, что системы уравнений (2) и (3) связаны граничными условиями на поверхности $x_3 = 0$ и должны решаться совместно.

Исключим магнитное поле $\mathbf{H}$ из уравнений (2) и подставим в полученное уравнение для $\mathbf{E}$ выражения (7), (8). Усредняя это выражение, находим

$$\frac{\partial^2\langle E_k\rangle}{\partial x_i\,\partial x_k} - \frac{\partial^2\langle E_i\rangle}{\partial x_k^2} = \frac{4\pi i\omega}{c^2}\langle j_i\rangle\,. \qquad (9)$$

Вычитая (9) из точных уравнений для $\mathbf{E}$, получаем уравнение для флуктуационной добавки $\delta\mathbf{E}$

$$\frac{\partial^2\delta E_k}{\partial x_i\,\partial x_k} - \frac{\partial^2\delta E_i}{\partial x_k^2} = \frac{4\pi i\omega}{c^2}\delta j_i\,. \qquad (10)$$

Здесь $\langle j_i(\mathbf{r})\rangle$ и $\delta j_i(\mathbf{r})$ заданы соответственно выражениями (8а) и (8б).

Из последнего выражения видно, что $\delta\mathbf{E}$ есть функционал случайного тока $\delta\hat{\sigma}_{ik}\{\langle E_k\rangle\}$. Тогда случайное поле

$$\delta E_i = \hat{\Lambda}_{ik}\left\{\delta\hat{\sigma}_{kl}\{\langle E_l\rangle\}\right\}. \qquad (11)$$

Ядро оператора $\hat{\Lambda}_{ik}$ — функция Грина уравнений Максвелла (2), (3) в случае, когда изотропный проводник (занимающий полупространство $x_3 > 0$) обладает проводимостью $\overline{\hat{\sigma}_{ik}}$.

Подставляя выражение (11) в формулу (8а), запишем выражение для средней плотности тока

$$\langle j_i(\mathbf{r})\rangle = \sigma_{ik}^{\text{eff}}\{\langle E_k\rangle\}\,; \quad \sigma_{ik}^{\text{eff}} = \hat{\sigma}_{ik} + \langle\delta\hat{\sigma}_{il}\hat{\Lambda}_{lm}\delta\hat{\sigma}_{mk}\rangle\,. \qquad (12)$$

Тогда уравнение для средней напряженности электрического поля $\langle\mathbf{E}(\mathbf{r})\rangle$ (см. (9)) с точностью до чле-

нов, квадратичных по флуктуациям тензора проводимости, есть

$$\frac{\partial^2\langle E_k\rangle}{\partial x_i\,\partial x_k} - \frac{\partial^2\langle E_i\rangle}{\partial x_k^2} = \frac{4\pi i\omega}{c^2}\,\sigma_{ik}^{\text{eff}}\,\{\langle E_k\rangle\}\,. \qquad (13)$$

Уравнения (13) должны быть использованы для вычисления эффективного импеданса, распределения среднего электрического поля по поликристаллу и других электромагнитных характеристик.

Изложенная формальная схема решения задачи была реализована в цитированных выше работах [7,8], где предполагалось, что длина свободного пробега $l$ значительно меньше всех параметров задачи размерности длины: глубины скин-слоя $\delta$ и среднего размера кристаллита $a$ (нормальный скин-эффект). В этом случае $\widehat{\sigma}_{ik}$ и $\delta\widehat{\sigma}_{ik}$ суть обычные тензоры — операторы умножения. Обратим внимание: из выражения (12) видно, что при учете флуктуаций поля эффективная проводимость за счет оператора $\widehat{\Lambda}_{ik}$ является нелокальной даже в этом локальном (по обычной терминологии) пределе. Это обстоятельство приводит к своеобразной «аномальности» нормального скин-эффекта в поликристаллах, исследованной в [7,8].

### 3. Кинетическое уравнение

Для построения оператора $\widehat{\sigma}_{ik}$ воспользуемся кинетической теорией. Если $f_1$ — неравновесная часть функции распределения электронов, то [13]

$$\mathrm{j} = \frac{2e}{(2\pi\hbar)^3}\int \mathrm{v} f_1 d^3p\,, \qquad (14)$$

а функция $f_1$ — решение линеаризованного кинетического уравнения

$$\mathrm{v}\frac{\partial f_1}{\partial \mathrm{r}} + \frac{f_1}{\tau} = -e\mathrm{v}\mathrm{E}\frac{\partial f_F}{\partial \varepsilon}\,. \qquad (15)$$

Здесь p — квазиимпульс электрона; $\mathrm{v} = (\partial\varepsilon(\mathrm{p}))/\partial\mathrm{p}$; $\varepsilon = \varepsilon(\mathrm{p})$ — энергия электрона с квазиимпульсом p (закон дисперсии электронов проводимости); $-\partial f_F/\partial\varepsilon$ с большой точностью есть $\delta(\varepsilon - \varepsilon_F)$, где $\varepsilon_F$ — энергия Ферми; $\tau$ — время релаксации (среднее время свободного пробега электронов). Для простоты мы ограничились $\tau$-приближением. Известно [14], что в двух предельных случаях ($l \gg \delta$ и $l \ll \delta$) этого приближения достаточно. Слагаемое $\partial f_1/\partial t$ опущено, так как нас будут интересовать не слишком высокие частоты ($\omega\tau \ll 1$).

Когда речь идет о поликристалле, использование уравнения (15) требует разъяснений. Прежде всего, все встречающиеся в задаче длины (средний размер кристаллита, глубина скин-слоя, длина свободного пробега) значительно превышают межатомные расстояния, и, следовательно, длину волны де-Бройля фермиевских электронов. Это означает, во-первых, возможность использовать квазиклассическое описание, и, во-вторых, не отличать квазиимпульс от импульса.

Итак, p — импульс. Зададим его в лабораторной системе координат, связанной с поверхностью образца. Пусть $p_1$, $p_2$, $p_3$ — проекции импульса на оси лабораторной системы координат. Из-за того, что кристаллографические оси кристаллитов произвольным образом ориентированы относительно осей лабораторной системы, параметры, описывающие закон дисперсии электронов $\varepsilon$(p), различны в разных кристаллитах, а компоненты вектора скорости v(p), записанные в лабораторной системе координат, изменяются при переходе от кристаллита к кристаллиту. Другими словами, можно считать, что скорость есть функция не только импульса p, но и координаты r: v = v(p; r). Во избежание недоразумений сделаем тривиальное замечание: скалярные величины, такие как энергия $\varepsilon_F$ и интегральные характеристики поверхности Ферми (ее объем $\Omega_F$ и площадь поверхности $S_F$), естественно, не изменяются при повороте кристаллографических осей, и поэтому они не зависят от координаты r.

Уравнение (15) для своего решения требует задания граничных условий: а) на поверхности образца (при $x_3 = 0$); б) в глубине материала ($x_3 \to \infty$); в) на границах кристаллитов.

Граничные условия в) на границах кристаллитов необходимы, если толщина межкристаллитных прослоек порядка межатомного расстояния, и, следовательно, случайные функции скачком меняются при переходе от кристаллита к кристаллиту. Оценки показывают (см. [7]), что «размытие» границ кристаллитов, т.е. использование плавных случайных функций вместо меняющихся скачкообразно, мало влияет на окончательный результат. Ниже используем подход, предполагающий размытость межкристаллических границ. Это означает, что мы можем не формулировать граничные условия на границах кристаллитов; рассеяние на межкристаллитной прослойке включено в $1/\tau$. Конечно, в этом случае время релаксации $\tau$ — случайная функция координаты r. Для простоты считаем, что $\tau$ — константа. Та упрощенная модель, с помощью которой удается решить задачу «до конца» (до числа), слишком примитивна, чтобы ее стоило усложнять введением различных времен ре-

лаксации в различных кристаллитах. В свое оправдание заметим, что если бы время релаксации зависело только от энергии электрона ($\tau = \tau(\varepsilon)$), то оно, действительно, было бы одинаковым во всех кристаллитах.

Формулировке граничных условий на реальной (шероховатой) поверхности образца и выяснению влияния этих условий на величину импеданса посвящено много работ (см. , например , [15]). Желая выяснить роль поликристалличности, воспользуемся простейшими граничными условиями, предположив, что поверхность образца зеркально отражает электроны проводимости [13]: $f_1(v_3 > 0)|_{x_3=0} = f_1(v_3 < 0)|_{x_3=0}$. Наконец, в глубине металла (при $x_3 \to \infty$) функция распределения должна быть равновесной: $f_1(x_3 \to \infty) = 0$.

Подставив решение кинетического уравнения (15) со сформулированными выше граничными условиями в выражение (14), находим интегральную зависимость плотности тока $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ от электрического поля $\mathbf{E}(\mathbf{r})$, т.е. определяем оператор $\hat{\sigma}_{ik}$. Зная этот оператор, можно провести весь расчет по схеме, изложенной в разд. 2. Однако даже в условиях нормального скин-эффекта, когда интегральный оператор $\hat{\sigma}_{ik}$ вырождается в оператор умножения, расчет очень громоздок.

### 4. Эффективная проводимость поликристалла в k-представлении

Из теории аномального скин-эффекта в монокристаллах хорошо известен прием, позволяющий существенно упростить вычисления [13]. В случае зеркального отражения электронов от поверхности образца интегро-дифференциальные уравнения для компонент вектора напряженности электрического поля можно решить, продолжив четным образом по $x_3$ поля $E_\alpha(\mathbf{r})$ ($\alpha = 1, 2$) на свободное от проводника полупространство ($x_3 < 0$). При этом интегральный оператор проводимости превращается в разностный, что дает возможность использовать стандартный метод Фурье. Надо только помнить, что на границе образца ($x_3 = 0$) искомое поле имеет излом, а его производные $\partial E_\alpha / \partial x_3$ испытывают скачок, величина которого пропорциональна $H_\beta(0)$ (компоненте напряженности магнитного поля, ортогональной $E_\alpha$).

Возможность использовать метод Фурье на конечном этапе вычисления электрического поля позволяет существенно облегчить расчет: используя метод Фурье, в k-представлении определяют тензор $\hat{\sigma}_{ik}$ в неограниченном металле, «вспоминая» о границе образца только при решении уравнений Максвелла.

Мы предположили, что метод Фурье можно использовать и для поликристаллического металла. Поскольку уравнения (8)–(10), (14) и (15) справедливы во всем пространстве, мы рассчитали тензор эффективной проводимости $\sigma_{ik}^{\mathrm{eff}}(\mathbf{k})$ в k-представлении, а наличие у образца границы учли на последнем этапе при решении уравнения (13). Проведя вычисления импеданса как для нормального, так и для аномального скин-эффекта двумя способами (следуя схеме, изложенной в разд. 2, и методом Фурье), убедились, что в обоих случаях результаты совпадают. Расчет методом Фурье значительно компактнее, поэтому мы избрали его для изложения.

Все функции, зависящие от r, разложим в интеграл Фурье. Например,

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \int \mathbf{E}(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{kr}) d^3k , \qquad (16а)$$

где

$$\mathbf{E}(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \mathbf{E}(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{kr}) d^3\mathbf{r} . \qquad (16б)$$

Запишем решение кинетического уравнения (15), не учитывая обусловленную разориентацией кристаллографических осей кристаллитов зависимость скорости v от координаты r. Это допустимо, если считать, что средний размер кристаллита $a$ значительно превосходит длину пробега $l$ — расстояние, на котором существенно меняется электрическое поле E. Неравенство

$$a \gg l \qquad (17)$$

будет считаться выполненым на протяжении всего расчета. Зависимость $\mathbf{v} = \mathbf{v}(\mathbf{r})$ учтем ниже, при записи флуктуационных поправок к тензору проводимости.

Если v не зависит от r, из уравнения (15) следует

$$f_1(\mathbf{k}) = \left(-\frac{\partial f_F}{\partial \varepsilon}\right) \frac{e\tau v_i v_k}{1 + i\mathbf{kv}\tau} E_k(\mathbf{k}) . \qquad (18)$$

Обратим внимание на замену оператора производной $\partial/\partial \mathbf{r}$ на $i\mathbf{k}$. Эта замена возможна только если считать, что функции, на которые действует оператор $\partial/\partial \mathbf{r}$ не имеют скачков, т. е. использовать модель размытых границ (см. выше).

Из (14) и (15) следует

$$j_i(\mathbf{k}) = \sigma_{ik}(\mathbf{k}) E_k(\mathbf{k}) ; \qquad (19)$$

$$\sigma_{ik}(\mathbf{k}) = -\frac{2e^2\tau}{(2\pi\hbar)^3}\int \frac{v_i v_k}{[1 + i\mathbf{k}v\tau]}\frac{\partial f_F}{\partial \varepsilon}\, d^3p\,. \quad (20)$$

Интегральный (нелокальный) характер связи между E(r) и j(r) проявляется в зависимости компонент тензора проводимости от волнового вектора k. Очевидно, заданный выражением (20) тензор $\sigma_{ik}(\mathbf{k})$ есть в k-представлении тензор проводимости монокристалла, из зерен которого состоит наш поликристалл. Тензор $\sigma_{ik}(\mathbf{k})$ записан в произвольной системе координат.

В пределе $kv\tau = 0$ из (20) получаем локальный тензор статической проводимости

$$\sigma_{ik}^{st} = -\frac{2e^2\tau}{(2\pi\hbar)^3}\int v_i v_k \frac{\partial f_F}{\partial \varepsilon}\, d^3p = \frac{2e^2\tau}{(2\pi\hbar)^3}\int \left(\frac{1}{M}\right)_{ik} f_F(\varepsilon) d^3p\,, \quad (21)$$

$(1/M)_{ik} = (\partial^2\varepsilon(\mathbf{p}))/(\partial p_i\, \partial p_k)$ — тензор обратных эффективных масс. (Вторая форма записи получается из первой интегрированием по частям.) В общем случае компоненты тензора обратных эффективных масс — функции импульса; равновесная функция распределения $f_F = f_F(\varepsilon)$ близка к единичной ступеньке и отнормирована на плотность электронов проводимости $n$ (температура $T \ll \varepsilon_F$):

$$n = \frac{2}{(2\pi\hbar)^3}\int f_F\, d^3p = \frac{2\Omega_F}{(2\pi\hbar)^3}\,, \quad (22)$$

$\Omega_F$ — объем, ограниченный поверхностью Ферми.

Осредненное по всевозможным ориентациям кристаллографических осей значение $\sigma_{ik}^{st}$ есть

$$\overline{\sigma_{ik}^{st}} = \bar{\sigma}\delta_{ik}\,,$$
$$\bar{\sigma} = \frac{1}{3}\,\mathrm{Sp}\,\sigma_{ik}^{st} = \frac{2e^2\tau}{3(2\pi\hbar)^3}\int \mathrm{Sp}\left(\frac{1}{M}\right)_{ik} f_F\, d^3p\,. \quad (23)$$

Формула (23) особенно наглядна в случае эллипсоидальной формы поверхности Ферми, когда тензор обратных эффективных масс не зависит от импульса p. В этом случае $\bar{\sigma} = ne^2\tau\,\mathrm{Sp}\,(1/M)_{ik}$. (Для изотропного металла $(1/M)_{ik} = (1/M)\delta_{ik}$, а $\sigma_{ik}^{st} = \sigma_0\delta_{ik}$, где $\sigma_0 = ne^2\tau/M$ (см., например, [18])).

Вычислим $\overline{\sigma_{ik}(\mathbf{k})}$ — осредненный по направлениям кристаллографических осей тензор $\sigma_{ik}(\mathbf{k})$ при произвольном значении параметра $kv\tau$. Структура этого тензора очевидна:

$$\overline{\sigma_{ik}(\mathbf{k})} = A(k)\delta_{ik} + B(k)\kappa_i\kappa_k\,;\ \kappa_i = \frac{k_i}{k}\,. \quad (24)$$

Несомненно, усреднение по направлениям кристаллографических осей эквивалентно усреднению по направлениям вектора k. Тогда из (20) и (24) получаем

$$A(k) = -\frac{e^2\tau}{(2\pi\hbar)^3}\int \frac{\partial f_F}{\partial \varepsilon}\, d^3p \oint \frac{dO_k}{4\pi}\,\frac{[v^2 - (\kappa_i v_i)^2]}{[1 + i\mathbf{k}v\tau]}\,; \quad (25а)$$

$$B(k) = -\frac{e^2\tau}{(2\pi\hbar)^3}\int \frac{\partial f_F}{\partial \varepsilon}\, d^3p \oint \frac{dO_k}{4\pi}\,\frac{[3(\kappa_i v_i)^2 - v^2]}{[1 + i\mathbf{k}v\tau]}\,; \quad (25б)$$

где $dO_k$ — элемент телесного угла в направлении вектора k. Производя интегрирование, получаем

$$A(k) = -\frac{e^2\tau}{(2\pi\hbar)^3}\int v^2 \frac{\partial f_F}{\partial \varepsilon}\, a(kv\tau) d^3p\,; \quad (26а)$$

$$B(k) = -\frac{e^2\tau}{(2\pi\hbar)^3}\int v^2 \frac{\partial f_F}{\partial \varepsilon}\, b(kv\tau) d^3p\,, \quad (26б)$$

где

$$a(x) = \frac{1}{x^2}\left\{\left(1 + x^2\right)\frac{\arctan x}{x} - 1\right\}; \quad (27а)$$

$$b(x) = \frac{1}{x^2}\left\{3 - \left(3 + x^2\right)\frac{\arctan x}{x}\right\}. \quad (27б)$$

При $kv\tau = 0$ формулы (26), естественно, тождественны формуле (23): $A(kv\tau = 0) = \bar{\sigma}$; $B(kv\tau = 0) = 0$. При $kv\tau \gg 1$ компоненты тензора осредненной проводимости (24) пропорциональны площади поверхности $S_F$. Поскольку при $x \gg 1$ $a(x) = b(x) \approx -\pi/2x$, а также учитывая, что $d^3p = (dS/v)d\varepsilon$, где $dS$ — элемент площади поверхности $\varepsilon = \varepsilon(\mathbf{p})$, из формул (26) в главном приближении по $1/kv\tau$ получаем

$$A(k) = -B(k) \approx \frac{\pi e^2 S_F}{2(2\pi\hbar)^3 k}\,. \quad (28)$$

Таким образом, при $kv\tau \gg 1$

$$\overline{\sigma_{ik}(\mathbf{k})} = \frac{\pi e^2 S_F}{2(2\pi\hbar)^3 k}\left(\delta_{ik} - \kappa_i\kappa_k\right). \quad (29)$$

При малой анизотропии формулу (24) можно использовать как нулевое приближение (без учета корреляций) для расчета поверхностного импеданса поликристалла. В условиях нормального скин-эффекта и в статике, когда кристаллиты опи-

сываются тензором статической проводимости (21), малость анизотропии обычно означает небольшое отличие проводимостей вдоль главных осей — факт, встречающийся весьма часто.

В условиях аномального скин-эффекта импеданс определяется электронами «пояска», на котором $\mathbf{kv} = 0$. Поперечную (относительно волнового вектора $\mathbf{k}$) проводимость можно записать следующим образом [16]:

$$\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = \frac{2\pi e^2}{(2\pi\hbar)^3}\kappa \int_0^{2\pi} n_\alpha n_\beta p_F^2\left(\frac{\pi}{2}, \varphi\right) d\varphi . \quad (30)$$

Здесь $\alpha, \beta = 1, 2$; $p_F^2 = p_F^2(\theta, \varphi)$ — радиус кривизны поверхности Ферми в точке $\theta, \varphi$ на единичной сфере направлений нормалей к поверхности Ферми ($\mathbf{n} = \mathbf{v}/v$); «пояску» соответствует $\theta = \pi/2$.

Если анизотропия проявляется в существовании отдельных маленьких «пятен» на сферической поверхности Ферми («прыщей» или «оспинок»), возможна ситуация, при которой для статической проводимости анизотропия отсутствует (кубический кристалл), а при аномальном скин-эффекте проявляется: «поясок» $\mathbf{kv} = 0$ либо проходит через «пятна», либо нет.

Малость анизотропии тензора $\sigma_{ik}(\mathbf{k})$ может означать, по-видимому, одно из двух: либо поверхность Ферми регулярно близка к сфере в каждой точке на поверхности (например, представляет собой эллипсоид с почти равными главными осями), либо на поверхности Ферми «вес» участков, в которых поверхность существенно отличается от сферы, мал (рис. 1). Зная, какой вычурный вид имеют поверхности Ферми большинства металлов, мы думаем все же, что сравнительно часто должны встречаться металлы, для которых справедливо предположение о малости анизотропии. Вероятно, это должно быть тогда, когда модель Харрисона [17] неплохо моделирует форму поверхности Ферми. Напомним, что построение Харрисона предполагает разрезание ферми-сферы свободных электронов, повторенной из-за эквивалентности центров, которые расположены на «расстоянии» $2\pi\hbar\mathbf{b}$ друг от друга, где $\mathbf{b}$ — вектор обратной решетки кристалла, и склейку другим способом. Конечно, последнее предположение нуждается в численной проверке.

Знание $\sigma_{ik}(\mathbf{k})$ и $\overline{\sigma_{ik}(\mathbf{k})}$ позволяет приступить к вычислению $\sigma_{ik}^{\text{eff}}(\mathbf{k})$ по формуле (12). Запишем плотность тока $\mathbf{j}$ в виде интеграла Фурье

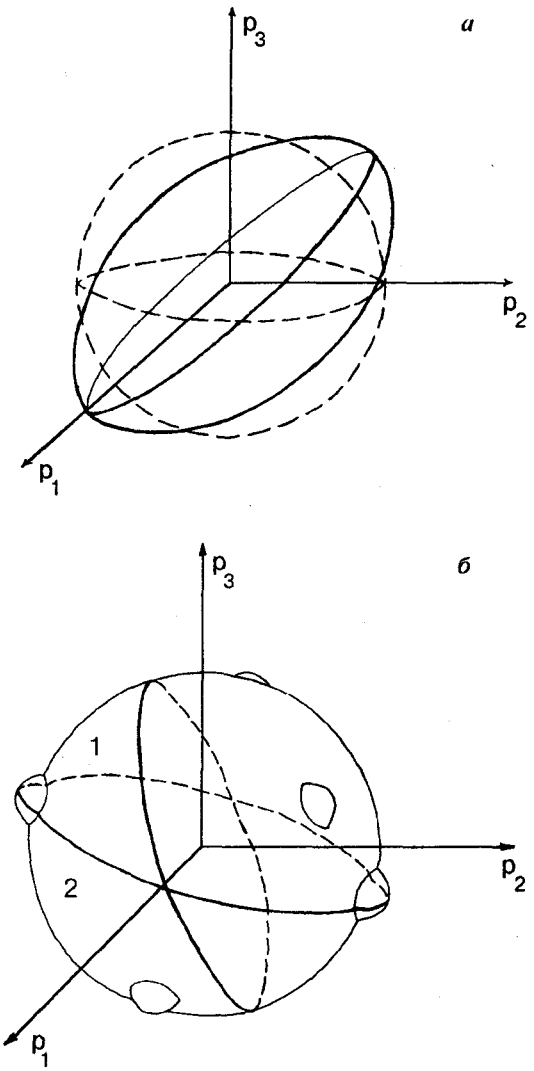


*Рис. 1.* Эллипсоидальная поверхность Ферми, регулярно близкая к сфере (*а*). Поверхность Ферми, представляющая собой сферу большого радиуса; в направлениях кристаллографических осей имеются небольшие выступы («прыщи»); отмечены два «пояска» $\mathbf{kv} = 0$: поясок (1) не проходит через выступы, поясок (2) проходит через выступы (*б*).

$$j_i(\mathbf{r}) = \int \exp(i\mathbf{kr})\,\sigma_{ik}(\mathbf{k})\,E_k(\mathbf{k})d^3k . \quad (31)$$

Учтем, что заданные соответственно формулами (20) и (24) выражения для $\sigma_{ik}(\mathbf{k})$ и $\overline{\sigma_{ik}(\mathbf{k})}$ получены в предположении, что скорость $\mathbf{v}$ не зависит от координат. Учтем зависимость $\mathbf{v} = \mathbf{v}(\mathbf{r})$ явно, записав

$$\sigma_{ik}(\mathbf{k};\mathbf{r}) = \overline{\sigma_{ik}(\mathbf{k})} + \delta\sigma_{ik}(\mathbf{k};\mathbf{r}) ;\ \overline{\delta\sigma_{ik}(\mathbf{k};\mathbf{r})} = 0 . \quad (32)$$

Теперь, используя представление (7) для электрического поля $\mathbf{E}(\mathbf{k})$ и усредняя выражение (31), получаем представление для средней плотности тока

$$\langle j_i(\mathbf{r})\rangle = \int \exp(i\mathbf{k}'\mathbf{r})\left\{\overline{\sigma_{ik}(\mathbf{k}')}\langle E_k(\mathbf{k}')\rangle + \langle\delta\sigma_{ik}(\mathbf{k}';\mathbf{r})\,\delta E_k(\mathbf{k}')\rangle\right\}d^3k' . \tag{33}$$

Линейная по флуктуациям случайная плотность тока есть

$$\delta j_i(\mathbf{r}) = \int \exp(i\mathbf{k}'\mathbf{r})\left[\delta\sigma_{ik}(\mathbf{k}';\mathbf{r})\,\langle E_k(\mathbf{k}')\rangle + \overline{\sigma_{ik}(\mathbf{k}')}\,\delta E_k(\mathbf{k}')\right]d^3k' . \tag{34}$$

Перейдем в формулах (33), (34) в k-представление, учтя, что $\delta\sigma_{ik}(\mathbf{k}';\mathbf{r})$ требует разложения в интеграл Фурье по второму аргументу:

$$\delta\sigma_{ik}(\mathbf{k}_1;\mathbf{r}) = \int \exp(i\mathbf{k}_2\mathbf{r})\,\delta\sigma_{ik}(\mathbf{k}_1;\mathbf{k}_2)d^3k_2 . \tag{35}$$

Тогда

$$\langle j_i(\mathbf{k})\rangle = \overline{\sigma_{ik}(\mathbf{k})}\,\langle E_j(\mathbf{k})\rangle + \int \langle\delta\sigma_{ik}(\mathbf{k}';\mathbf{k}-\mathbf{k}')\,\delta E_k(\mathbf{k}')\rangle\,d^3k' , \tag{36а}$$

$$\delta j_i(\mathbf{k}) = \overline{\sigma_{ik}(\mathbf{k})}\,\delta E_k(\mathbf{k}) + \int \delta\sigma_{ik}(\mathbf{k}';\mathbf{k}-\mathbf{k}')\,\langle E_k(\mathbf{k}')\rangle\,d^3k' . \tag{36б}$$

При записи выражения (36а) учтено, что операции интегрирования и усреднения переставимы.

Закон сохранения заряда требует равенства нулю div j. Отсюда

$$\mathbf{k}\langle\mathbf{j}(\mathbf{k})\rangle = 0 ; \quad \mathbf{k}\delta\mathbf{j}(\mathbf{k}) = 0 . \tag{37}$$

Второе равенство, позволяя легко вычислить $\mathbf{k}\delta\mathbf{E}(\mathbf{k})$, помогает решить систему уравнений (10) для случайных полей, которая в k-представлении имеет вид

$$k^2\delta E_i(\mathbf{k}) - k_i(\mathbf{k}\delta\mathbf{E}(\mathbf{k})) = \frac{4\pi i\omega}{c^2}\,\delta j_i(\mathbf{k}) . \tag{38}$$

Используя выражение (24) для тензора средней проводимости, получаем

$$\delta E_i(\mathbf{k}) = \Lambda_{ik}(\mathbf{k})\int \delta\sigma_{kl}(\mathbf{k}';\mathbf{k}-\mathbf{k}')\langle E_l(\mathbf{k}')\rangle\,d^3k' , \tag{39а}$$

где

$$\Lambda_{ik}(\mathbf{k}) = \frac{1}{[k^2 - (4\pi i\omega/c^2)A(k)]}\left\{\frac{4\pi i\omega}{c^2}\,\delta_{ik} - \kappa_i\kappa_k\,\frac{k^2 + (4\pi i\omega/c^2)B(k)}{A(k)+B(k)}\right\} \tag{39б}$$

Тензор $\Lambda_{ik}(\mathbf{k})$ — функция Грина в k-представлении уравнений Максвелла изотропного металла для неограниченного пространства (ср. с формулой (11)). Во избежание недоразумения отметим, что размерность компонент тензора $\delta\sigma_{ik}(\mathbf{k};\mathbf{k}')$ (с двумя аргументами!) отличается от размерности компонент тензора $\sigma_{ik}(\mathbf{k})$ (с одним аргументом): $[\delta\sigma] = [\sigma][k]^3$.

Имея выражение для $\delta\mathbf{E}(\mathbf{k})$, можно определить средний ток $\langle j_i(\mathbf{k})\rangle$ как функционал среднего поля:

$$\langle j_i(\mathbf{k})\rangle = \overline{\sigma_{ik}(\mathbf{k})}\,\langle E_k(\mathbf{k})\rangle + \int\int d^3k'd^3k''\Lambda_{kl}(\mathbf{k}')\,\langle\delta\sigma_{ik}(\mathbf{k}';\mathbf{k}-\mathbf{k}'')\,\delta\sigma_{lm}(\mathbf{k}'';\mathbf{k}'-\mathbf{k}'')\rangle\langle E_m(\mathbf{k}'')\rangle . \tag{40}$$

Для вычисления коррелятора, входящего в формулу (40), вернемся к случайному тензору $\delta\sigma_{ik}(\mathbf{k};\mathbf{r})$, который определен формулами (32), (24), (20). Как уже отмечалось выше, зависимость компонент этого тензора от r связана только с тем, что в лабораторной системе координат скорость электрона проводимости v(p) меняется от кристаллита к кристаллиту. В предположении, что $l \ll a$, и при учете пространственной однородности статистических свойств поликристалла это позволяет записать парный коррелятор тензоров $\delta\sigma_{ik}(\mathbf{k}_1;\mathbf{r}_1)$ и $\delta\sigma_{pq}(\mathbf{k}_2;\mathbf{r}_2)$ в виде

$$\langle\delta\sigma_{ik}(\mathbf{k}_1;\mathbf{r}_1)\,\delta\sigma_{pq}(\mathbf{k}_2;\mathbf{r}_2)\rangle = \Sigma_{ik;pq}(\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2)\,W(|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|) , \tag{41}$$

где не зависящий от координат изотропный тензор четвертого ранга

$$\Sigma_{ik,pq}(\mathbf{k}_1\ ,\ \mathbf{k}_2) = \langle \delta\sigma_{ik}(\mathbf{k}_1\ ;\ \mathbf{r})\ \delta\sigma_{pq}(\mathbf{k}_2\ ;\ \mathbf{r})\rangle \qquad (42)$$

есть интересующий нас коррелятор для случая, когда вектора $\mathbf{r}_1$ и $\mathbf{r}_2$ соответствуют одному и тому же кристаллиту, а $W(|\mathbf{r}|)$ — вероятность того, что вектор $\mathbf{r}$ целиком принадлежит одному кристаллиту*. Если векторы $\mathbf{r}_1$ и $\mathbf{r}_2$ принадлежат разным кристаллитам, то

$$\langle \delta\sigma_{ik}(\mathbf{k}_1\ ;\ \mathbf{r}_1)\ \delta\sigma_{pq}(\mathbf{k}_2\ ;\ \mathbf{r}_2)\rangle =$$

$$= \langle \delta\sigma_{ik}(\mathbf{k}_1\ ;\ \mathbf{r}_1)\rangle\ \langle \delta\sigma_{pq}(\mathbf{k}_2\ ;\ \mathbf{r}_2)\rangle = 0\ .$$

Функция $W(|\mathbf{r}|)$ описывает корреляционные свойства поликристалла. Очевидно, $W(r = 0) = 1$.

Теперь, используя формулу (35), легко видеть, что

$$\langle \delta\sigma_{ik}(\mathbf{k}_1\ ;\ \mathbf{q}_1)\ \delta\sigma_{pq}(\mathbf{k}_2\ ;\ \mathbf{q}_2)\rangle =$$

$$= \Sigma_{ik;pq}(\mathbf{k}_1\ ,\ \mathbf{k}_2)\ W(|\mathbf{q}_1|)\ \delta(\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2)\ , \qquad (43)$$

где $W(|\mathbf{q}|)$ — фурье-образ функции $W(|\mathbf{r}|)$.

Итак, из формул (41)–(43) следует

$$\langle j_i(\mathbf{k})\rangle = \sigma^{\text{eff}}_{ik}(\mathbf{k})\ \langle E_k(\mathbf{k})\rangle\ , \qquad (44)$$

где эффективная проводимость в k-представлении есть

$$\sigma^{\text{eff}}_{ik}(\mathbf{k}) = \overline{\sigma_{ik}(\mathbf{k})} +$$

$$+ \int d^3k'\Lambda_{ml}(\mathbf{k}')\ \Sigma_{im;lk}(\mathbf{k}',\ \mathbf{k})\ W(|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|)\ . \qquad (45)$$

Второе слагаемое в выражении (45) описывает квадратичные поправки к средней проводимости, обязанные флуктуациям оператора проводимости.

Ниже тензор $\Sigma_{im;lk}(\mathbf{k}_1\ ,\ \mathbf{k}_2)$ будет рассчитан для простой модели, в которой поверхность Ферми представляет собой эллипсоид вращения, слабо отличающийся от сферы. Можно надеяться, что такой расчет адекватно описывает вклад флуктуационного члена в эффективную проводимость и тогда, когда поверхность Ферми не является эллипсоидом, однако регулярно близка к сфере. В этом случае при слабой анизотропии тензор $\Sigma_{im;lk}(\mathbf{k}_1\ ,\ \mathbf{k}_2)$ имеет следующую структуру:

$$\Sigma_{im;lk}(\mathbf{k}_1\ ,\ \mathbf{k}_2) = \xi^2 D_{pq;rs}\ S_{impq}(\mathbf{k}_1)\ S_{lkrs}(\mathbf{k}_2)\ , \qquad (46)$$

где $\xi^2$ — численная мера анизотропии закона дисперсии; тензор $S_{impq}(\mathbf{k})$ описывает влияние волнового вектора на проводящие свойства монокристалла, а независящий от $\mathbf{k}$ изотропный тензор $D_{pq;rs}$ — усредненный по всевозможным направлениям кристаллографических осей тензор 4-го ранга, построенный из направляющих косинусов (см. ниже формулу (53б)). Случай малой анизотропии, обусловленной наличием небольших участков, в которых поверхность Ферми существенно отличается от сферы, будет рассмотрен в отдельной публикации.

Если эффективная проводимость поликристаллического металла в k-представлении известна, вычисление импеданса проводится по стандартной схеме [13]. Ниже эффективный импеданс поликристаллического металла рассчитан для указанной простой модели.

## 5. Эллипсоидальная поверхность Ферми

### *5. 1. Вычисление эффективной проводимости*

Пусть поверхность Ферми монокристаллического металла, из зерен которого состоит данный поликристалл, представляет собой эллипсоид вращения. Пусть закон дисперсии этого металла есть

$$\varepsilon(\mathbf{p}) = \frac{1}{2m_{\parallel}}\left(p^2_{1c} + p^2_{2c}\right) + \frac{1}{2m_{\perp}}\,p^2_{3c}\ , \qquad (47а)$$

$p_{ic}$ — компоненты вектора $\mathbf{p}$ в кристаллографической системе осей. Если вектор $\mathbf{p}$ задан своими компонентами $p_i$ в лабораторной системе осей, то уравнение этого эллипсоида имеет вид

$$\varepsilon(\mathbf{p}) = \frac{1}{2}\,M^{-1}_{pq}p_p p_q\ , \qquad (47б)$$

где тензор обратных масс

$$M^{-1}_{pq} = \frac{1}{M}\left(\delta_{pq} + \xi\omega_{pq}\right)\ , \qquad (48а)$$

$1/M$ — среднее арифметическое обратных масс,

$$\frac{1}{M} = \frac{1}{3}\left(\frac{2}{m_{\parallel}} + \frac{1}{m_{\perp}}\right)\ , \qquad (48б)$$

параметр

* Формула (42) обобщает формулу (6) из [7] на случай нелокального тензора проводимости.

$$\xi = \frac{(1/m_\perp) - (1/m_\parallel)}{1/M} \qquad (48в)$$

— численная мера анизотропии закона дисперсии (при изменении отношения $m_\perp/m_\parallel$ от нуля до бесконечности $\xi$ меняется в интервале $-3/2 < \xi < 3$). Анизотропия мала, если $|\xi| << 1$. Тензор

$$\omega_{pq} = \alpha_{p3}\alpha_{q3} - \frac{1}{3}\delta_{pq}, \qquad (48г)$$

где $\alpha_{ik}$ — косинус угла между $i$-й осью лабораторной системы осей и $k$-й кристаллографической осью. Очевидно, $\mathrm{Sp}\,\omega_{ik} = 0$. Вместе с направляющими косинусами $\alpha_{ik}$ тензор $\omega_{ik}$ меняется при переходе от кристаллита к кристаллиту. Следовательно, в рамках принятой нами модели $\omega_{ik} = \omega_{ik}(\mathbf{r})$. При осреднении по всевозможным направлениям кристаллографических осей

$$\overline{\omega_{ik}(\mathbf{r})} = 0. \qquad (48д)$$

Следуя изложенной выше схеме, для расчета эффективной проводимости прежде всего по формуле (20) надо вычислить проводимость $\sigma_{ik}(\mathbf{k})$ в произвольной системе координат, считая, что скорость $\mathbf{v} = (\partial\varepsilon)/\partial\mathbf{p}$ зависит только от импульса $\mathbf{p}$ (в нашем случае это означает, что тензор $\omega_{ik}$ не зависит от $\mathbf{r}$). При квадратичном законе дисперсии (47) удобно сначала вычислить компоненты этого тензора в кристаллографической системе осей, переходя в (20) от интегрирования по объему эллипсоида к интегрированию по объему сферы радиусом $\sqrt{2\varepsilon_F M}$, а затем записать компоненты этого тензора в лабораторной системе координат. В результате при произвольном значении параметра анизотропии $\xi$ получаем

$$\sigma_{ik}(\mathbf{k}) = \frac{3\bar{\sigma}}{2}\left\{\left(\delta_{ik} + \xi\omega_{ik}\right) a(klf) + \right.$$

$$\left. + \frac{1}{f^2}\left(\delta_{ip} + \xi\omega_{ip}\right)\left(\delta_{kp} + \xi\omega_{kq}\right) b(klf)\kappa_p\kappa_q \right\}, \qquad (49)$$

где $\kappa_i = k_i/k$, $f = [1 + \xi\omega_{rs}\kappa_r\kappa_s]^{1/2}$, функции $a(x)$ и $b(x)$ заданы выражениями (27); $l = \tau\sqrt{2\varepsilon_F/M}$, а $\bar{\sigma}$ — осредненная статическая проводимость (см. формулу (23))

$$\bar{\sigma} = \frac{ne^2\tau}{M};\quad n = \frac{2\Omega_F}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{8\pi(2\varepsilon_F)^{3/2}}{3(2\pi\hbar)^3}\sqrt{m_\parallel^2 m_\perp}. \qquad (50)$$

Выделим из выражения (49) осредненную проводимость $\overline{\sigma_{ik}(\mathbf{k})} = \bar{\sigma}_{ik}(\mathbf{k}) + \delta\sigma_{ik}(\mathbf{k})$. Если $kl = 0$, то, очевидно, при произвольном $\xi$

$$\overline{\sigma_{ik}(\mathbf{k})}\Big|_{kl=0} = \bar{\sigma}\delta_{ik};\ \delta\sigma_{ik}\Big|_{kl=0} = \xi S^0_{iklm}\omega_{lm};$$
$$S^0_{iklm} = \bar{\sigma}\delta_{il}\delta_{km}. \qquad (51)$$

При $kl >> 1$ из (49) в согласии с формулами (28), (29) получаем

$$\overline{\sigma_{ik}(\mathbf{k})}\Big|_{kl>>1} = A(k)\left[\delta_{ik} - \kappa_i\kappa_k\right], \qquad (52а)$$

где $A(k) = (\pi e^2 S_F)/(2(2\pi\hbar)^3 k)$, $S_F$ — площадь поверхности Ферми. С точностью до членов порядка $\xi$

$$\delta\sigma_{ik}(\mathbf{k})\Big|_{kl>>1} = \xi S^\infty_{iklm}(\mathbf{k})\omega_{lm}, \qquad (52б)$$

где

$$S^\infty_{iklm}(\mathbf{k}) = A(k)\left\{\delta_{il}\delta_{km} + \right.$$

$$\left. + \frac{1}{2}\kappa_l\kappa_m\left(-\delta_{ik} + 3\kappa_i\kappa_k\right) - \left(\kappa_i\kappa_l\delta_{km} + \kappa_k\kappa_l\delta_{im}\right)\right\}. \qquad (52в)$$

Теперь мы должны учесть зависимость компонент тензора $\omega_{pq}$ от координат и по формуле (42) вычислить коррелятор $\Sigma_{ik;pq}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)$. Структура этого тензора задана формулой (46). Формулы (51) и (52с) дают предельные выражения компонент тензора $S_{iklm}(\mathbf{k})$ при $kl = 0$ и $kl >> 1$ соответственно. Тензор $D_{ik;pq}$ в (46) есть

$$D_{pq;rs} = \langle\omega_{pq}(\mathbf{r})\,\omega_{rs}(\mathbf{r})\rangle. \qquad (53а)$$

Учитывая, что $\mathrm{Sp}\,\omega_{pq} = 0$, находим

$$D_{pq;rs} = \frac{1}{45}\left\{-2\delta_{pq}\delta_{rs} + 3\left(\delta_{pr}\delta_{qs} + \delta_{ps}\delta_{rq}\right)\right\}. \qquad (53б)$$

Формулы (39б), (46), (51), (52) задают все тензоры, которые необходимо знать для расчета эффективной проводимости поликристалла в $\mathbf{k}$-представлении (см. формулу (45)).

Вернемся к равенствам (37), представляющим собой закон сохранения заряда. Первое из них требует, чтобы проекция среднего тока на направление вектора $\mathbf{k}$ была равна нулю. Если $\mathbf{k} = (0, 0, k)$, это означает, что $\langle j_3(\mathbf{k})\rangle = \sigma_{3j}(\mathbf{k})\langle E_j(\mathbf{k})\rangle = 0$. Легко проверить, что равны нулю компоненты $\sigma^{\mathrm{eff}}_{3\alpha}(\mathbf{k})$ тензора эффективной проводимости. Как и раньше, греческие индексы принимают значения 1, 2; латинские индексы — значения 1, 2, 3. Тогда из

обращения в нуль тока $\langle j_3(\mathbf{k})\rangle$ следует равенство нулю среднего продольного электрического поля $\langle E_3(\mathbf{k})\rangle$. Компоненты тока $\langle j_\alpha(\mathbf{k})\rangle$ связаны с поперечным средним полем $\langle E_\beta(\mathbf{k})\rangle$ тензором $\sigma^{\text{eff}}_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$ (см. формулы (45), (46)):

$$\sigma^{\text{eff}}_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = \overline{\sigma_{\alpha\beta}}(\mathbf{k}) + \xi^2 D_{pq;rs}\, S_{\alpha mpq}(\mathbf{k}) \times$$

$$\times \int d^3k' \Lambda_{ml}(\mathbf{k}')\, S_{\beta lrs}(\mathbf{k}')\, W(|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|)\,. \quad (54)$$

Запишем тензор $\sigma^{\text{eff}}_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$ при различных соотношениях между параметрами размерности длины. Как отмечалось выше, в задаче вычисления эффективного импеданса поликристалла имеются три параметра размерности длины: средний размер кристаллита $a$, длина свободного пробега $l$ и глубина скин-слоя $\delta$.

Параметр $a$ — заданная характеристика поликристалла. По порядку величины значение $a$ совпадает с радиусом действия корреляционной функции $W(|\mathbf{r}|)$. Следовательно, основной вклад в интеграл, входящий в формулу (54), дают те значения $k'$, для которых $|\mathbf{k}-\mathbf{k}'| \le 1/a$. В силу неравенства (17) ограничимся рассмотрением случая $l/a \ll 1$.

Глубина скин-слоя $\delta$ зависит от частоты падающей волны и соотношения между $l$ и $\delta$. При малой анизотропии значение $\delta$ для поликристалла порядка глубины скин-слоя изотропного металла с проводимостью $\overline{\sigma_{ik}}(\mathbf{k})$. В условиях нормального скин-эффекта [13] ($l \ll \delta$)

$$\delta \approx \delta_n\,, \text{ где } \delta_n = \frac{c}{(2\pi\bar\sigma\omega)^{1/2}}\,;\ \omega \ll \frac{c^2}{\bar\sigma l^2}\,. \quad (55а)$$

В условиях аномального скин-эффекта [12] ($l \gg \delta$)

$$\delta \approx \delta_a\,, \text{ где } \delta_a = \left(\frac{4\pi c^2\hbar^3}{\omega e^2 S_F}\right)^{1/3}\,;\ \omega \gg \frac{c^2\hbar^3}{l^3 e^2 S_F}\,. \quad (55б)$$

Значение $\delta$ определяет порядок величины модуля вектора $\mathbf{k}$: $k \sim 1/\delta$.

Формула (54) позволяет вычислить компоненты тензора $\sigma^{\text{eff}}_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$ при произвольном соотношении между $\delta$ и характерными размерами $l$ и $a$ ($l \ll a$). Заметим, что в среднем поликристалл является изотропным телом, поэтому

$$\sigma^{\text{eff}}_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = \sigma^{\text{eff}}(\mathbf{k})\,\delta_{\alpha\beta}\,. \quad (56)$$

1. Начнем со случая нормального скин-эффекта ($l \ll \delta$). Заменяя в выражении (54) тензоры $S_{iklm}(\mathbf{k})$ на $S^0_{iklm}$ (см. (51)), учитывая при записи компонент тензора $\Lambda_{ik}(\mathbf{k})$ (см. (39б)), что $A(kl=0) = \bar\sigma$; $B(kl=0) = 0$ и сделав замену $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{q}$, получаем $\sigma^{\text{eff}}(k)|_{l\ll\delta} = \sigma^{\text{eff}}_n(k)$, где

$$\sigma^{\text{eff}}_n(k) = \bar\sigma\left\{1 + \frac{\xi^2}{45}\int \frac{d^3qW(q)}{[(\mathbf{k}+\mathbf{q})^2 - (2i/\delta_0^2)]}\left[\frac{20i}{\delta_0^2} - (\mathbf{k}+\mathbf{q})^2\left(3 + \frac{\sin^2\theta}{2}\right)\right]\right\}. \quad (57)$$

Угол $\theta$ определен условием $\cos\theta = \dfrac{\mathbf{k}(\mathbf{k}+\mathbf{q})}{k|\mathbf{k}+\mathbf{q}|}$.

При вычислении интеграла в формуле (57) необходимо различать случай предельно низких частот (квазистатический предел, $\delta \gg a \gg l$) и случай сравнительно высоких частот ($a \gg \delta \gg l$).

А. Квазистатический предел $\delta \gg a \gg l$.

При таком соотношении параметров $1/\delta \sim k \ll q \sim 1/a$. Тогда, учитывая, что корреляционная функция $W(r)$ нормирована на единицу и, следовательно,

$$\int d^3qW(q) = 1\,, \quad (58)$$

получаем

$$\sigma^{\text{eff}}_n(k)\Big|_{l\ll a\ll\delta} \doteq \sigma^{(\text{eff})}_{\text{st}} = \bar\sigma\left\{1 - \frac{2}{27}\xi^2\right\}. \quad (59)$$

Формулу (59) можно переписать в более привычном виде, если учесть, что в соответствии с формулой (51)

$$\Delta^2 = \frac{1}{3\bar\sigma^2}\left(\delta\sigma_{ik}\,\delta\sigma_{ki}\right)\Big|_{kl=0} = \frac{2}{9}\xi^2\,. \quad (60а)$$

Из (59) получаем известное выражение для эффективной статической проводимости слабо анизотропного поликристалла

$$\sigma^{(\text{eff})}_{\text{st}} = \bar\sigma\left\{1 - \frac{\Delta^2}{3}\right\}. \quad (60б)$$

Б. Сравнительно высокие частоты $l \ll \delta \ll a$.

В этом случае $1/\delta \sim k \gg q \sim 1/a$ и, следовательно,

$$\sigma_n^{(\mathrm{eff})}(k)\Big|_{l<<\delta<<a} = \bar{\sigma}\left\{1 + \frac{\xi^2}{45}\,\frac{[20i - (k\delta_n)^2]}{[(k\delta_n)^2 - 2i]}\right\}. \tag{61}$$

Обратим внимание, что зависимость $\sigma_n^{(\mathrm{eff})}$ от $k$ означает, что в поликристаллах среднее электрическое поле и средний ток связаны нелокально даже при выполнении условия $l << \delta$. Эта своеобразная «аномальность» нормального скин-эффекта означает, что в поликристаллах пространственная дисперсия проводимости проявляется при таких частотах уже тогда, когда в монокристаллах ею можно полностью пренебречь (см. разд. 2 и [7,8]).

2. Для вычисления $\sigma_{\alpha\beta}^{\mathrm{eff}}(\mathrm{k})$ при аномальном скин-эффекте ($l >> \delta$), заменим тензоры $S_{iqpk}(\mathrm{k})$ в формуле (54) на тензоры $S_{iqpk}^{\infty}$ (см. (52в)). Делая опять замену $\mathrm{k}' = \mathrm{k} + \mathrm{q}$ и учитывая, что и при таком соотношении параметров $k >> q$, получаем $\delta_a^{\mathrm{eff}}(k) = \sigma^{\mathrm{eff}}(k)|_{\delta<<l<<a}$, где (с учетом формул (28), (29), (55б), (58))

$$\sigma_a^{(\mathrm{eff})}(k) = A(k)\left\{1 + \frac{2}{9}\,\frac{i\xi^2}{[(k\delta_a)^3 - i]}\right\}. \tag{62}$$

### *5.2. Вычисление эффективного импеданса*

Зная эффективную проводимость кристалла в k-представлении, можно решить задачу о скин-эффекте и вычислить эффективный импеданс поликристалла (см. формулу (1)).

Металл занимает полупространство $x_3 > 0$. Средняя напряженность электрического поля в металле удовлетворяет уравнениям (9). Считая, что электрическое поле в падающей волне поляризовано вдоль оси 1 и продолжая $\langle E_1(x_3)\rangle$ четно на область $x_3 < 0$, запишем уравнения (9) в k-представлении, учитывая, что производная $\partial\langle E_1\rangle/\partial x_3$ испытывает скачок на поверхности $x_3 = 0$, величина которого пропорциональна значению среднего магнитного поля на поверхности [13]:

$$\frac{i\omega}{\pi c}\langle H_2(0)\rangle + k^2\langle\overline{E}_1(k)\rangle = \frac{4\pi i\omega}{c^2}\,\sigma^{\mathrm{eff}}(k)\langle E_1(k)\rangle, \tag{63}$$

откуда

$$\langle E_1(k)\rangle = -\frac{i\omega}{\pi c}\,\frac{\langle H_2(0)\rangle}{[k^2 - (4\pi i\omega/c^2)\,\sigma^{\mathrm{eff}}(k)]}. \tag{64}$$

Восстанавливая $\langle E_1(x_3)\rangle$ по фурье-образу (64) и учитывая, что $\sigma^{\mathrm{eff}}(k)$ — четная функция $k$, находим:

$$\gamma^{\mathrm{eff}} = -\frac{2i\omega}{\pi c}\int_0^{\infty}\frac{dk}{[k^2 - (4\pi i\omega/c^2)\,\sigma^{\mathrm{eff}}(k)]}. \tag{65}$$

При вычислении этого интеграла необходимо иметь в виду, что в формулах (59), (61) и (62) для $\sigma^{\mathrm{eff}}(k)$ поправки, обусловленные разориентацией кристаллографических осей отдельных кристаллитов (флуктуаций), вычислены с точностью порядка $\xi^2$. Этой же точностью надо ограничиться и при вычислении эффективного импеданса.

Запишем $\gamma^{\mathrm{eff}}$ в виде

$$\gamma^{\mathrm{eff}} = \bar{\gamma}\left\{1 + \xi^2\Gamma\left(\frac{l}{\delta}, \frac{a}{\delta}\right)\right\}, \tag{66}$$

где $\bar{\gamma}$ — значение импеданса изотропного металла, рассчитанное по средней проводимости без учета поправок, обязанных флуктуациям оператора проводимости, а коэффициент $\Gamma$ зависит от соотношения между параметрами $l$, $a$ и $\delta$ (рис. 2). Из формулы (65) получаем:

в случае нормального скин-эффекта

$$\bar{\gamma}\Big|_{l<<\delta} = \bar{\gamma}_n = \sqrt{\frac{\omega}{8\pi\bar{\sigma}}}\,(1 - i); \tag{67}$$

$$\Gamma\Big|_{\frac{l}{\delta}<<\frac{a}{\delta}<<1} \equiv \Gamma_1 = \frac{1}{27}; \tag{68а}$$

$$\Gamma\Big|_{\frac{l}{\delta}<<1<<\frac{a}{\delta}} \equiv \Gamma_2 = \frac{11}{120}; \tag{68б}$$

в случае аномального скин-эффекта (при зеркальном отражении электронов проводимости)

$$\bar{\gamma}\Big|_{l>>\delta} = \bar{\gamma}_a = \left(1 - i\sqrt{3}\right)\frac{2\pi^{1/3}\hbar}{3^{3/2}}\left(\frac{4\pi\omega^2}{ce^2S_F}\right)^{1/3}, \tag{69}$$

$$\Gamma\Big|_{1<<\frac{l}{\delta}<<\frac{a}{\delta}} \equiv \Gamma_3 = \frac{4}{81}. \tag{70}$$

В работах [7,8] для описания анизотропии проводимости в условиях нормального скин-эффекта

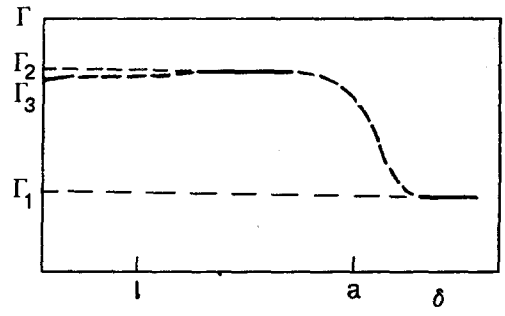


*Рис. 2.* Коэффициент Γ как функция глубины проникновения $\delta$. Сплошная линия — значения Γ из формулы (71).

в качестве параметра использован обезразмеренный квадрат девиатора тензора проводимости $\Delta^2$ (см. формулу (60а)). Выраженная через $\Delta^2$ поправка к импедансу для нормального скин-эффекта не зависит от вида тензора $\sigma_{ik}$ монокристалла, из зерен которого состоит поликристалл. Для любого слабоанизотропного поликристалла

$$\xi^2\Gamma\left(\frac{l}{\delta}\to 0;\frac{a}{\delta}\right)=\frac{\gamma^{\text{eff}}-\bar{\gamma}}{\bar{\gamma}}=\begin{cases}(1/6)\Delta^2; & a/\delta \ll 1;\\ (33/80)\Delta^2; & a/\delta \gg 1.\end{cases} \tag{71}$$

Формально универсальность формул (71) связана с тем, что для локального тензора проводимости $\sigma_{ik}^{\text{st}}$ (см. формулу (21)) компоненты тензора $\Sigma_{ik;pq}$ (см. (42)), входящего в выражение ((45)) для $\sigma_{ik}^{\text{eff}}(\mathbf{k})$, есть

$$\Sigma_{ik;pq}\big|_{kl=0}=\frac{2}{9}\Delta^2 D_{ik;pq}.$$

Конечно, значение $\Delta^2$ свое для каждого металла и зависит от закона дисперсии электронов. Однако численные коэффициенты в формуле (71) одинаковы для всех металлов.

В условиях аномального скин-эффекта (тензор проводимости $\sigma_{ik}(\mathbf{k})$) задан выражением (30)) компоненты тензора $\Sigma_{ik;pq}(\mathbf{k}',\mathbf{k})$ зависят от $\mathbf{k}'$ и $\mathbf{k}$. Конкретный вид этой зависимости определяется законом дисперсии электронов в исходном монокристалле.

Выше выражение (62) для $\sigma_a^{\text{eff}}(k)$ и значение коэффициента $\Gamma_3$ (см. (70)) были рассчитаны для квадратичного закона дисперсии (47). Мы не исследовали, как поправки $(\gamma^{\text{eff}}-\bar{\gamma})/\bar{\gamma}\,|_{\delta\ll l\ll a}$ к импедансу $\bar{\gamma}$ зависят от конкретного вида закона дисперсии. Мы надеемся, что оценка (70) адекватно описывает эти поправки в том случае, когда реальная поверхность Ферми монокристалла регулярно близка к сфере.

Обратим внимание на резкое увеличение коэффициента $\Gamma$ при переходе из квазистатической области значения параметров ($l \ll a \ll \delta$) в область сравнительно высоких частот ($l \ll \delta \ll a$): $\Gamma_2/\Gamma_1 \approx$ $\approx$ 2,5. По-видимому, это связано с тем, что в квазистатической области эффективная проводимость совпадает с эффективной проводимостью среды с трехмерными неоднородностями (см. (60б)). При уменьшении глубины проникновения $\delta$ в сравнении с размером кристаллита $a$ задача вычисления эффективной проводимости при проникновении электромагнитного поля в металл скорее напоминает соответствующую задачу для случая двумерных неоднородностей (но не совпадает с последней!). Известно, что при переходе от трехмерного случая к двумерному роль флуктуаций возрастает.

Заканчивая эту статью, мы хотим повторить, что другие модели анизотропии будут предметом отдельной публикации.

Нам приятно, что статья, развивающая теорию аномального скин-эффекта, публикуется в номере, посвященном 90-му дню рождения Б. Г. Лазарева. Наш интерес к электронной теории металлов в большой степени обусловлен экспериментами Бориса Георгиевича и его сотрудников в УФТИ в 50-е годы.

Работа И. М. Каганова по этой теме поддержана грантом RFFI 96-02-17740.

1. И. М. Лифшиц, Л. Н. Розенцвейг (1946); переиздано в кн.: И. М. Лифшиц, *Избранные труды*, Наука, Москва (1987), с. 316.
2. И. М. Лифшиц, Г. Д. Пархомовский, *ЖЭТФ* **20**, 175 (1950).
3. И. М. Лифшиц, М. И. Каганов, В. М. Цукерник (1950); переиздано в кн. : И. М. Лифшиц, *Избранные труды*, Наука, Москва (1987), с. 337.
4. P. Bussemer, K. Hehl, S. Kassam, and M. I. Kaganov, *Waves in Random Media* **2**, 113 (1991).
5. L. L. Bonilla and J. B. Keller, *J. Mech. Phys. Solids* **33**, 241 (1985).
6. I. M. Kaganova and A. A. Maradudin, *Phys. Scr.* **T44**, 104 (1992).
7. I. M. Kaganova and M. I. Kaganov, *Phys. Lett.* **A173**, 473 (1993).
8. I. M. Kaganova and M. I. Kaganov, *Waves in Random Media* **3**, 177 (1993).
9. I. M. Kaganova, *Phys. Rev.* **B51**, 5333 (1995).
10. А. М. Дыхне, *ЖЭТФ* **59**, 110 (1970).
11. Ю. А. Дрейзин, А. М. Дыхне, *ЖЭТФ* **63**, 242 (1972); **84**, 1756 (1983).
12. G. E. Reuter and E. H. Sondheimer, *Proc. R. Soc. London* **A195**, 336 (1949).
13. Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Физическая кинетика*, Наука, Москва (1979).
14. М. И. Каганов, Г. Я. Любарский, Е. Червонко, *ЖЭТФ* **101**, 1351 (1992).
15. L. Falkovsky, *Adv. Phys.* **32**, 753 (1983).
16. М. И. Каганов, М. Я. Азбель, *ДАН СССР* **102**, 49 (1955).
17. В. Хейне, М. Коэн, Д. Уэйр, *Теория псевдопотенциала*, Мир, Москва (1973).
18. Дж. Займан, *Принципы теории твердого тела*, Мир, Москва (1974).

## Skin effect in polycrystals

I. M. Kaganova and M. I. Kaganov

With the assumption of weak anisotropy of conductivity tensor of single crystal grains forming a polycrystal, the effective impedance of the polycrystal-line metal has been estimated under anomalous skin-effect when a mean crystallite size is greater than the electron free path length. In the calculation the perturbation theory was used, as well as the Fourier transformation permitting to avoid calculation of random fields in r-representation. Using the Fourier method, the expressions have been reconstructed obtained earlier for the effective impedance of polycrystalline metal under normal skin effect. The calculation procedure proposed makes it possible to estimate the effective impedance of polycrystals of different metals. In the case of anomalous skin-effect, the numerical value of effective impedance has been calculated in the framework of a simple model of quadratic dispersion law of conduction electrons of initial single crystal.