ЭКРАНИРОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТНЫХ ЗАРЯДОВ И ДИПОЛЕЙ НА ГРАНИЦАХ РАЗДЕЛА АНИЗОТРОПНЫХ КРИСТАЛЛОВ. ЭФФЕКТ «ДАЛЬНОДЕЙСТВИЯ»

Э.А.Пашицкий, А.Э.Пашицкий

Институт физики Академии наук Украины,
252650, Киев, Украина
(Поступила в Редакцию 2 февраля 1995 г.)

С помощью метода функций Грина для продольного (кулоновского) поля в слоистых системах анизотропных проводящих сред рассмотрена задача об экранировке поверхностных зарядов и диполей, распределенных неоднородно (периодически) вдоль границ раздела сред. Показано, что в случае достаточно сильной одноосной анизотропии слоистых или цепочечных кристаллов с металлической проводимостью вдоль слоев или цепочек при определенных условиях глубина проникновения электростатических полей в объем кристаллов может значительно превышать как эффективную длину экранирования, так и характерный размер (период) в распределении поверхностных зарядов (диполей). Обсуждается возможное влияние такого эффекта «дальнодействия», возникающего при анизотропном экранировании, на электрополевой эффект в высокотемпературных сверхпроводниках.

Исследования электрополевого эффекта в высокотемпературных сверхпроводниках (ВТСП-материалах) на основе купратных металлооксидных соединений (МОС) со слоистой или слоисто-цепочечной кристаллической структурой [1,2] являются в настоящее время весьма актуальными и направлены на выяснение возможности управления сверхпроводящими (СП) свойствами МОС с помощью электростатических полей [3]. Эта проблема тесно связана с изучением процессов экранирования зарядов в сильно анизотропных проводящих средах вблизи макродефектов (трещин, границ зерен в поликристаллах или гранул в керамиках и т.п.). Так, например, в биокристаллах $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ на высокоугловых границах с двойникованием наблюдается квазипериодическая сеть скоплений краевых дислокаций несоответствия [4], которые в силу ионности решетки купратных МОС должны нести нескомпенсированные заряды и дипольные моменты.

В настоящей работе с помощью развитого в [5-8] метода функций Грина для продольного (кулоновского) поля в слоистых системах анизотропных проводящих сред рассмотрена задача об экранировке поверхностных зарядов и диполей, распределенных неоднородно (периодически) вдоль границ раздела сред. Показано, что в случае сильной одноосной анизотропии слоистых или цепочечных кристаллов при определенных условиях глубина проникновения электростатических полей может значительно превышать как эффективную длину экранирования в плоскости слоев или вдоль цепочек, так и характерный размер (период) в распределении поверхностных зарядов (диполей). Такой эффект «дальнодействия» может играть важную роль в ВТСП-материалах, изменяя их СП-свойства (например, критическую температуру СП-перехода T_c или критический ток j_c) в макроскопических объемах в окрестности границ раздела или других дефектов благодаря перераспределению подвижных носителей заряда (электронов, дырок) в электростатических полях.

1. Кулоновская функция Грина в слоистых системах анизотропных сред при наличии поверхностных зарядов и диполей на границах раздела

Для описания экранировки зарядов в пространственно ограниченных или слоистых макроскопических системах проводящих сред мы будем использовать развитый в работах [5–8] метод функций Грина самосогласованного продольного (кулоновского) поля. Однако в [5–8] предполагалось, что все среды являются изотропными, и не учитывалось возможное существование на границах раздела сред нескомпенсированных поверхностных зарядов и диполей. Поэтому в качестве граничных условий использовались стандартные условия непрерывности потенциала $\varphi(\mathbf{r})$ и нормальной составляющей вектора электростатической индукции $\mathbf{D}(\mathbf{r})$, перпендикулярной плоскости границы xy.

В данной работе учитывается как сильная анизотропия диэлектрических и экранирующих свойств слоистых и цепочечных кристаллов, так и существование неоднородного (периодического) распределения плотности поверхностных зарядов $\sigma(x,y)$ и диполей $P(x,y)$, когда и нормальная компонента индукции D_z, и потенциал φ испытывают конечные скачки на границах раздела сред, равные соответственно $4\pi\sigma$ и $4\pi P$.

1) Граница раздела полубесконечных сред с одноосной анизотропией. Кулоновская функция Грина вблизи границы раздела полубесконечных сред в плоскости $z = 0$ при наличии поверхностных зарядов и диполей может быть представлена в объеме одной из сред ($z > 0$) в следующем виде:

$$D_1(\mathbf{k}_\perp, z) = D_1^0(\mathbf{k}_\perp, z) + \Delta D_1^\sigma(\mathbf{k}_\perp, z) + \Delta D_1^P(\mathbf{k}_\perp, z), \qquad (1)$$

где D_1^0 — объемная часть функции Грина для одиночного заряда e в точке z, равная (см. [6,7])

$$D_1^0(\mathbf{k}_\perp, z) = -4\pi e\left\{\frac{a_1^2(\mathbf{k}_\perp, z)}{a_1(\mathbf{k}_\perp, 0) + a_2(\mathbf{k}_\perp, 0)} - \frac{1}{2}\Big[a_1(\mathbf{k}_\perp, 2z) + a_1(\mathbf{k}_\perp, 0)\Big]\right\}, \qquad (2)$$

$k_\perp = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$, а ΔD_1^σ и ΔD_1^P — соответственно зарядовая и дипольная части функций Грина, которые имеют вид[1]

$$\Delta D_1^\sigma(\mathbf{k}_\perp, z) = -4\pi\sigma(\mathbf{k}_\perp)\frac{a_1(\mathbf{k}_\perp, z)\, a_2(\mathbf{k}_\perp, 0)}{a_1(\mathbf{k}_\perp, 0) + a_2(\mathbf{k}_\perp, 0)}, \qquad (3)$$

[1] Для изотропных сред аналогичные соотношения были получены в [9].

$$\Delta D_1^P(\mathbf{k}_\perp, z) = -4\pi P(\mathbf{k}_\perp)\frac{a_1(\mathbf{k}_\perp, z)}{a_1(\mathbf{k}_\perp, 0) + a_2(\mathbf{k}_\perp, 0)}. \tag{4}$$

Здесь $\sigma(\mathbf{k}_\perp)$ и $P(\mathbf{k}_\perp)$ — фурье-компоненты неоднородного распределения поверхностных зарядов и диполей вдоль границы раздела, а функции $a_j(\mathbf{k}_\perp, z)$ в частном случае одноосно анизотропных сред при условии, что ось анизотропии перпендикулярна границе раздела, определяются выражениями ($j = 1, 2$)

$$a_j(\mathbf{k}_\perp, z) = \frac{1}{\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{dk_z\, e^{ik_z z}}{k_\perp^2 \varepsilon_\perp^{(j)}(\mathbf{k}) + k_z^2 \varepsilon_\parallel^{(j)}(\mathbf{k})}, \tag{5}$$

где $\varepsilon_\perp^{(j)}(\mathbf{k})$ и $\varepsilon_\parallel^{(j)}(\mathbf{k})$ — поперечная (в плоскости xy) и продольная (вдоль оси z) составляющие тензора диэлектрической проницаемости (ДП) в j-й среде, а $k = \sqrt{k_\perp^2 + k_z^2}$.

Выражение (5) является отражением того факта, что в анизотропном красталле экранированный кулоновский потенциал в приближении среднего поля имеет вид [10,11]

$$\tilde{V}_C(\mathbf{k}) \equiv \frac{4\pi e^2}{k_l\, \hat{\varepsilon}_{lm}(\mathbf{k})\, k_m} = \frac{4\pi e^2}{k_\perp^2\, \varepsilon_\perp(\mathbf{k}) + k_z^2\, \varepsilon_\parallel(\mathbf{k})}. \tag{5a}$$

Пусть среда 1 в области $z > 0$ представляет собой анизотропный слоистый или цепочечный металл (полупроводник) с $\varepsilon_\perp^{(1)}(\mathbf{k}) \neq \varepsilon_\parallel^{(1)}(\mathbf{k})$, а среда 2 в области $z < 0$ — изотропный диэлектрик с $\varepsilon_\perp^{(2)} = \varepsilon_\parallel^{(2)} = \varepsilon_2 = \mathrm{const}$.

Для достаточно малых значений $\mathbf{k}$, т.е. на масштабах длин, значительно превышающих расстояния между слоями или цепочками, с хорошей точностью можно положить

$$\varepsilon_\perp^{(1)}(k) = \varepsilon_\perp^0\left(1 + \frac{\varkappa_\perp^2}{k^2}\right), \qquad \varepsilon_\parallel^{(1)}(k) = \varepsilon_\parallel^0\left(1 + \frac{\varkappa_\parallel^2}{k^2}\right), \tag{6}$$

где $\varepsilon_\perp^0$ и $\varepsilon_\parallel^0$ — поперечная и продольная ДП решетки, а $\varkappa_\perp$ и $\varkappa_\parallel$ — соответственно поперечная и продольная обратные длины экранирования в приближении Томаса–Ферми (или Дебая–Хюккеля). Подставляя выражения (6) в (5), получаем

$$a_1(k_\perp, z) = \frac{2}{\pi\varepsilon_\parallel^0}\int\limits_0^{\infty} \frac{(k_z^2 + k_\perp^2)\cos k_z z\, dk_z}{[k_z^2 + \beta_+^2(k_\perp)][k_z^2 + \beta_-^2(k_\perp)]} =$$

$$= \frac{1}{\varepsilon_\parallel^0[\beta_+^2(k_\perp) - \beta_-^2(k_\perp)]}\left\{\frac{e^{-z\beta_+(k_\perp)}}{\beta_+(k_\perp)}\left[\beta_+^2(k_\perp) - k_\perp^2\right] - \frac{e^{-z\beta_-(k_\perp)}}{\beta_-(k_\perp)}\left[\beta_-^2(k_\perp) - k_\perp^2\right]\right\}, \tag{7}$$

где

$$\beta_\pm^2(k_\perp) = \frac{1}{2}\left[k_\perp^2\left(1 + (\varepsilon_\perp^0/\varepsilon_\parallel^0)\right) + \varkappa_\parallel^2\right] \pm$$

$$\pm\sqrt{\frac{1}{4}\left[k_\perp^2\left(1 + (\varepsilon_\perp^0/\varepsilon_\parallel^0)\right) + \varkappa_\parallel^2\right]^2 - k_\perp^2(\varepsilon_\perp^0/\varepsilon_\parallel^0)(k_\perp^2 + \varkappa_\perp^2)}. \tag{8}$$

С другой стороны, для изотропной среды ($j = 2$) находим

$$a_2(k_\perp, z) = \frac{2}{\pi \varepsilon_2} \int\limits_0^\infty \frac{\cos k_z z \, dk_z}{k_z^2 + k_\perp^2} = \frac{e^{-k_\perp |z|}}{\varepsilon_2 \, k_\perp}. \tag{9}$$

Выражения (7)–(9) совместно с фурье-компонентами $\sigma(\mathbf{k}_\perp)$ и $P(\mathbf{k}_\perp)$ полностью определяют зарядовую и дипольную части кулоновской функции Грина (3) и (4).

2) Трехслойная система сред. Рассмотрим трехслойную систему сред, состоящую из анизотропной пленки толщиной L с поперечной и продольной ДП вида (6), окруженной с двух сторон полубесконечными средами, которые для простоты будем считать одинаковыми и изотропными с ДП $\varepsilon_2 = \text{const}$. В этом случае зарядовая составляющая кулоновской функции Грина внутри пленки (в области $0 \leqslant z \leqslant L$) имеет вид

$$\Delta D_\sigma(\mathbf{k}_\perp, z) = -\frac{4\pi a_2(k_\perp, 0)}{B(k_\perp)} \Big\{ [\sigma_1(\mathbf{k}_\perp) + \sigma_2(\mathbf{k}_\perp)] \, a_S(k_\perp, z) \times$$

$$\times [a_A(k_\perp, 0) + a_2(k_\perp, 0)] + [\sigma_1(\mathbf{k}_\perp) - \sigma_2(\mathbf{k}_\perp)] \, a_A(k_\perp, z) [a_S(k_\perp, 0) + a_2(k_\perp, 0)] \Big\}, \tag{10}$$

где

$$B(k_\perp) = 2[a_S(k_\perp, 0) + a_2(k_\perp, 0)][a_A(k_\perp, 0) + a_2(k_\perp, 0)], \tag{11}$$

$$a_{S,A}(k_\perp, z) = \frac{2}{L} \sum_{k_\parallel^{A,S}} \frac{\cos k_\parallel z}{k_\parallel^2 \varepsilon_\parallel(\mathbf{k}) + k_\perp^2 \varepsilon_\perp(\mathbf{k})}, \tag{12}$$

$$k_\parallel^S(n) = \frac{2n\pi}{L}, \qquad k_\parallel^A(n) = \frac{(2n+1)\pi}{L}, \qquad n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \tag{13}$$

$\sigma_1(\mathbf{k}_1)$ и $\sigma_2(\mathbf{k}_\perp)$ — фурье-компоненты плотностей поверхностных зарядов на разных границах раздела (в плоскостях $z = 0$ и $z = L$), $\varepsilon_\perp(\mathbf{k})$ и $\varepsilon_\parallel(\mathbf{k})$ — поперечная и продольная ДП анизотропной проводящей пленки (см. (6)), а функция $a_2(k_\perp, z)$ определяется выражением (9) для диэлектрических сред (в областях $z < 0$ и $z > L$).

Подставляя в (12) выражения (6) и выполняя суммирование по симметричным (четным) для $a_S(k_\perp, z)$ и по антисимметричным (нечетным) для $a_A(k_\perp, z)$ дискретным продольным волновым числам $k_\parallel^S(n)$ и $k_\parallel^A(n)$, получаем

$$a_S(k_\perp, z) = \frac{1}{\varepsilon_\parallel^0 [\beta_+^2(k_\perp) - \beta_-^2(k_\perp)]} \left\{ \frac{\operatorname{ch}\left[\left(\frac{L}{2} - z\right) \beta_+(k_\perp)\right]}{\beta_+(k_\perp) \operatorname{sh}\left[\frac{L}{2} \beta_+(k_\perp)\right]} \times \right.$$

$$\left. \times \left[\beta_+^2(k_\perp) - k_\perp^2\right] - \frac{\operatorname{ch}\left[\left(\frac{L}{2} - z\right) \beta_-(k_\perp)\right]}{\beta_-(k_\perp) \operatorname{sh}\left[\frac{L}{2} \beta_-(k_\perp)\right]} \left[\beta_-^2(k_\perp) - k_\perp^2\right] \right\}, \tag{14}$$

$$a_A(k_\perp, z) = \frac{1}{\varepsilon_\parallel^0[\beta_+^2(k_\perp) - \beta_-^2(k_\perp)]}\left\{\frac{\mathrm{sh}\left[\left(\frac{L}{2} - z\right)\beta_+(k_\perp)\right]}{\beta_+(k_\perp)\,\mathrm{ch}\left[\frac{L}{2}\beta_+(k_\perp)\right]}\times\right.$$

$$\left.\times\left[\beta_+^2(k_\perp) - k_\perp^2\right] - \frac{\mathrm{sh}\left[\left(\frac{L}{2} - z\right)\beta_-(k_\perp)\right]}{\beta_-(k_\perp)\,\mathrm{ch}\left[\frac{L}{2}\beta_-(k_\perp)\right]}\left[\beta_-^2(k_\perp) - k_\perp^2\right]\right\}. \tag{15}$$

В частном случае одинаково распределенных зарядов на обеих границах пленки $\sigma_1(\mathbf{k}_\perp) = \sigma_2(\mathbf{k}_\perp) = \sigma(\mathbf{k}_\perp)$ из (10) и (11) следует выражение, аналогичное (3)

$$\Delta D_\sigma(k_\perp, z) = -4\pi\sigma(\mathbf{k}_\perp)\frac{a_S(k_\perp, z)\,a_2(k_\perp, 0)}{a_S(k_\perp, 0) + a_2(k_\perp, 0)}. \tag{16}$$

В случае поверхностных зарядов противоположного знака $\sigma_1(\mathbf{k}_\perp) = -\sigma_2(\mathbf{k}_\perp) = \sigma(\mathbf{k}_\perp)$, когда пленка представляет собой дипольный слой, согласно (10) и (11) получаем

$$\Delta D_\sigma(k_\perp, z) = -4\pi\sigma(\mathbf{k}_\perp)\frac{a_A(k_\perp, 0)\,a_2(k_\perp, 0)}{a_A(k_\perp, 0) + a_2(k_\perp, 0)}. \tag{17}$$

Из (14), (15) следует, что электростатическое поле поверхностных зарядов хорошо проникает в пленку при условии $\beta_\pm L \gtrsim 1$.

3) Бикристалл из разориентированных анизотропных кристаллов. Рассмотрим границу раздела бикристалла, состоящего из двух анизотропных кристаллов, оси симметрии которых образуют между собой некоторый угол.

Такие структуры возникают, например, при выращивании бикристаллов $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ в плоскости a–b [4], анизотропия которой связана с наличием упорядоченных $1D$-цепочек CuO в направлении оси $\mathbf{b}$ (при $\delta \ll 1$) наряду с изотропными $2D$-слоями CuO_2. При этом, как показано в [4], могут возникать также двойникование кристаллов $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ с некоторым характерным размером двойниковых доменов $L_0 \approx 1000\,\text{Å}$ (вдоль границы раздела) и сгущения краевых дислокаций несоответствия в точках пересечения границ доменов с границей бикристалла с периодом $2L_0$. Кроме того, вдоль границы раздела бикристалла существует более густая квазипериодическая сеть дислокаций несоответствия с периодом $d_0 \approx 100\,\text{Å}$. Поскольку кристаллическая решетка купратных МОС обладает достаточно сильной ионной связью, можно ожидать, что скопления и сетки краевых дислокаций несут на себе нескомпенсированные заряды и дипольные моменты.

Полагая, что граница раздела в плоскости xy расположена вдоль линии $x = 0$, а ось $\mathbf{b}$ в одном из доменов кристалла (в области $x > 0$) составляет угол φ_0 с границей, при $k_z = 0$ получаем следующее выражение для функции $a_1(k_y, x)$ в этом домене:

$$a_1(k_y, x) = \frac{1}{\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{dk_x\,e^{ik_x x}}{k_x^2\varepsilon_{xx}(\mathbf{k}) + k_x k_y[\varepsilon_{xy}(\mathbf{k}) + \varepsilon_{yx}(\mathbf{k})] + k_y^2\varepsilon_{yy}(\mathbf{k})}, \tag{18}$$

где компоненты тензора ДП ε_{xx}, ε_{xy}, ε_{yx} и ε_{yy} выражаются через диагональные компоненты $\varepsilon_{\parallel}(\mathbf{k})$ и $\varepsilon_{\perp}(\mathbf{k})$ вдоль и поперек оси $\mathbf{b}$ соответственно следующим образом:

$$\hat{\varepsilon}_{lm}(\mathbf{k}) = \begin{vmatrix} \varepsilon_{xx}(\mathbf{k}), & \varepsilon_{xy}(\mathbf{k}) \\ \varepsilon_{yx}(\mathbf{k}), & \varepsilon_{yy}(\mathbf{k}) \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \varepsilon_{\perp}(\mathbf{k}) \cos\varphi_0, & \varepsilon_{\perp}(\mathbf{k}) \sin\varphi_0 \\ -\varepsilon_{\parallel}(\mathbf{k}) \sin\varphi_0, & \varepsilon_{\parallel}(\mathbf{k}) \cos\varphi_0 \end{vmatrix}. \tag{19}$$

Компоненты k_x и k_y волнового вектора $\mathbf{k}$, направленного под углом φ к линии границы $x = 0$, связаны между собой соотношением $k_x = k_y \operatorname{tg}\varphi$. С учетом этого, а также соотношений (6) и (19) выражение (18) с помощью подстановки $t = \operatorname{tg}\varphi$ можно привести к виду

$$a_1(k_y, x) = \frac{1}{\pi\varepsilon_{\perp}^0\, k_y\, \cos\varphi_0} \int\limits_{-\infty}^{\infty} dt\,(t^2+1)\, e^{ik_y x\, t} \times$$

$$\times \left\{ (t^2+1)\Big[t^2 - (\varepsilon - 1)\operatorname{tg}\varphi_0\, t + \varepsilon\Big] + \varkappa\Big[t^2 - (\varepsilon\nu - 1)\operatorname{tg}\varphi_0\, t + \varepsilon\nu\Big] \right\}^{-1}, \tag{20}$$

где

$$\varepsilon = \varepsilon_{\parallel}^0/\varepsilon_{\perp}^0, \qquad \nu = \varkappa_{\parallel}^2/\varkappa_{\perp}^2, \qquad \varkappa = \varkappa_{\perp}^2/k_y^2. \tag{21}$$

При $\varphi_0 = 0$ выражение (20) переходит в (7). В общем случае ($\varphi_0 \neq 0$) полюса подынтегрального выражения определяются корнями уравнения четвертого порядка

$$t^4 - (\varepsilon-1)\operatorname{tg}\varphi_0 t^3 + (1+\varepsilon+\varkappa)\, t^2 - [(\varepsilon-1)+\varkappa(\varepsilon\nu-1)]\operatorname{tg}\varphi_0\, t + \varepsilon(1+\nu\varkappa) = 0. \tag{22}$$

В предельном случае $\varkappa_{\perp} \gg k_y$ (т.е. $\varkappa \gg 1$) уравнение (22) распадается на два квадратных уравнения, корни которых равны попарно (при $\varphi_0 \neq \pi/2$).

$$t_{1,2} = \frac{1}{2}(\varepsilon - 1)\operatorname{tg}\varphi_0 \pm \sqrt{\frac{1}{4}(\varepsilon - 1)^2 \operatorname{tg}^2\varphi_0 - \varkappa}, \tag{23}$$

$$t_{3,4} = \frac{1}{2}(\varepsilon\nu - 1)\operatorname{tg}\varphi_0 \pm \sqrt{\frac{1}{4}(\varepsilon\nu - 1)^2 \operatorname{tg}^2\varphi_0 - \varepsilon\nu}. \tag{24}$$

В зависимости от значений параметров ε, ν и $\varkappa$ и угла наклона φ_0 эти решения могут быть либо вещественными, либо комплексными, что влияет на характер проникновения электростатического поля.

2. Глубина проникновения электростатических полей поверхностных зарядов и диполей в анизотропную среду

Распределение электростатического поля поверхностных зарядов (диполей) внутри полубесконечной анизотропной среды 1 определяется выражением

$$V_{\sigma,P}(x,y,z) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} dk_x \int\limits_{-\infty}^{\infty} dk_y\, \Delta D_1^{\sigma,P}(k_{\perp}, z)\, e^{i(k_x x + k_y y)}. \tag{25}$$

Рассмотрим простую модель периодического распределения поверхностных зарядов или диполей вдоль границы раздела сред ($z = 0$) в виде одномерной синусоидальной волны зарядовой или дипольной плотности (ВЗП или ВДП) с периодом d_0, распространяющейся вдоль оси x на фоне однородного поверхностного заряда σ_0 или дипольного слоя P_0

$$\sigma(x) = \sigma_0 + \sigma_1 \cos(2\pi x/d_0), \tag{26}$$

$$P(x) = P_0 + P_1 \cos(2\pi x/d_0). \tag{27}$$

Фурье-компоненты таких ВЗП и ВДП имеют вид

$$\sigma(k_x, k_y) = \left[\sigma_0 \delta(k_x) + \sigma_1 \delta\left(k_x - \frac{2\pi}{d_0}\right)\right] \delta(k_y), \tag{28}$$

$$P(k_x, k_y) = \left[P_0 \delta(k_x) + P_1 \delta\left(k_x - \frac{2\pi}{d_0}\right)\right] \delta(k_y), \tag{29}$$

где $\delta(x)$ — дельта-функция. Заметим, что для произвольного периодического распределения зарядов и диполей выражения (26)–(29) следует заменить суммами по фурье-гармоникам с периодами d_0/n ($n = 1, 2, 3, \ldots$).

Подставляя (28) и (29) в (3) и (4), а затем в (25), получим

$$V_\sigma(x, z) = -4\pi\sigma_0\, a_1(0, z) - 4\pi\sigma_1 \frac{a_1(k_{0,z})\, a_2(k_0, 0)}{a_1(k_0, 0) + a_2(k_0, 0)} \cos k_0\, x, \tag{30}$$

$$V_P(x, z) = -4\pi P_1 \frac{a_1(k_0, z)}{a_1(k_0, 0) + a_2(k_0, 0)} \cos k_0\, x, \tag{31}$$

где $k_0 = 2\pi/d_0$. Заметим, что в дипольном потенциале V_P отсутствует нулевая (однородная по x) компонента, поскольку при $k_\perp \to 0$, согласно (9), $a_2(k_\perp, 0) \to \infty$ для диэлектрической среды. В том случае, когда среда 2 является изотропным металлом или легированным полупроводником с ДП типа

$$\varepsilon_2(k) = \varepsilon_2^0(1 + \varkappa_2^2/k^2), \tag{32}$$

функция $a_2(k_\perp, z)$, согласно (5), принимает вид

$$a_2(k_\perp, z) = \frac{\exp\{-|z|\sqrt{k_\perp^2 + \varkappa_2^2}\}}{\varepsilon_2^0\sqrt{k_\perp^2 + \varkappa_2^2}} \tag{33}$$

и остается конечной при $k_\perp = 0$. При этом V_P имеет отличную от нуля однородную компоненту как в среде 1 ($z > 0$)

$$V_P^{(1)}(0, z) = -4\pi P_0 \frac{a_1(0, z)}{a_1(0, 0) + a_2(0, 0)}, \tag{34}$$

так и внутри среды 2 ($z < 0$)

$$V_P^{(2)}(0, z) = -4\pi P_0 \frac{a_2(0, z)}{a_1(0, 0) + a_2(0, 0)}, \tag{35}$$

которая убывает с ростом z и $|z|$, согласно (7), (8), (30) и (35), по экспоненциальному закону ($V_P^{(1)} \sim e^{-\varkappa_\parallel z}$ и $V_P^{(2)} \sim e^{-\varkappa_2 |z|}$).

Рассмотрим проникновение периодической (знакопеременной) составляющей электростатического поля поверхностных зарядов (диполей) в анизотропную среду 1, которая описывается функцией $a_1(k_0, z)$. Согласно (8), параметры $\beta_\pm(k_0)$ в зависимости от соотношения между k_0 и длинами анизотропной экранировки $\varkappa_\perp$ и $\varkappa_\parallel$ могут быть как вещественными, так и комплексными, что соответствует либо монотонному экспоненциально убывающему, либо осциллирующему вдоль оси z (по затухающему) потенциалу электростатического поля (30) или (31).

1) А н и з о т р о п н ы й с л о и с т ы й к р и с т а л л с м е т а л л и ч е с к о й п р о в о д и м о с т ь ю в д о л ь и п о п е р е к с л о е в. Предположим, что в слоистом кристалле анизотропная проводимость имеет металлический характер (сопротивление растет с повышением температуры T) как вдоль, так и поперек слоев, как это имеет место, например, в монокристаллах $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ ($\delta \ll 1$), имеющих достаточно сильную анизотропию эффективных масс электронов ($m_\perp^* \ll m_\parallel^*$). Это соответствует анизотропии макроскопических эффектов экранирования, поскольку в приближении Томаса–Ферми отношение длин экранирования $\varkappa_\perp$ и $\varkappa_\parallel$ равно

$$\varkappa_\perp / \varkappa_\parallel = \left(m_\perp^* \varepsilon_\parallel^0 / m_\parallel^* \varepsilon_\perp^0 \right)^{1/2}. \tag{36}$$

Если $\varepsilon_\parallel^0 > \varepsilon_\perp^0$, но $\varepsilon_\parallel^0 / \varepsilon_\perp^0 \ll m_\parallel^* / m_\perp^*$, то $\varkappa_\parallel^2 \gg \varkappa_\perp^2$, и величины $\beta_\pm^2(k_0)$ вещественны и положительны при любых k_0. На рисунке, *a* показана зависимость амплитуды знакопеременной части потенциалов (30), (31) от z для вещественных $\beta_\pm(k_0)$. Для этого случая характерны быстрое (экспоненциальное) затухание поля при малых z и существование медленно затухающего «хвоста» за счет второго слагаемого в (7), пропорционального $e^{-z\beta_-}$ с $\beta_- \ll \beta_+$. При этом глубина проникновения поля равна

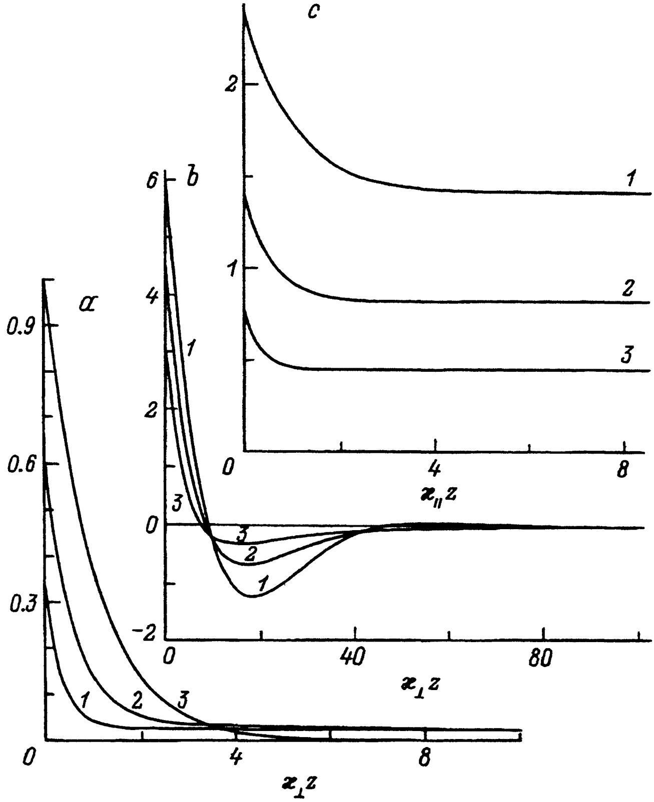
$$\lambda_0 = \frac{d_0}{2\pi} (m_\parallel^* / m_\perp^*)^{1/2} \tag{37}$$

и при условии $m_\parallel^* / m_\perp^* \gg 4\pi^2$ может значительно превышать период d_0 в распределении поверхностных зарядов (диполей). Относительная амплитуда проникающей компоненты поля равна $(k_0^2 \varepsilon_\parallel^0 / \varkappa_\perp^2 \varepsilon_\perp^0)^{1/2}$ и мала при $k_0 \ll \varkappa_\perp$.

Для тонких пленок толщиной L хорошее проникновение поля обеспечивается при $\lambda_0 \gtrsim L$, т.е. при достаточно большом периоде распределения поверхностных зарядов (диполей) на границах пленки

$$d_0 \gtrsim 2\pi L (m_\perp^* / m_\parallel^*)^{1/2}. \tag{38}$$

2) С л о и с т ы й к р и с т а л л с к в а з и д в у м е р н ы м э л е к т р о н н ы м с п е к т р о м. Представляет интерес рассмотрение сильно анизотропного слоистого кристалла с квазидвумерным электронным спектром в плоскости слоев и экспоненциально малой вероятностью туннелирования электронов между слоями, когда проводимость вдоль слоев является металлической, а в направлении оси z



Зависимости от z функции $a_1(k_0, z)$, которая определяет амплитуду знакопеременной составляющей электростатического поля периодически распределенных поверхностных зарядов $\sigma(x)$ и диполей $P(x)$ на границе раздела анизотропных сред.

a — слоистый кристалл с $\varepsilon_{\parallel}^0 = \varepsilon_{\perp}^0$ и с металлической проводимостью вдоль и поперек слоев при $k_0 \equiv 2\pi/d_0 = 0.1\varkappa_{\perp}$. Значения $\varkappa_{\parallel}/\varkappa_{\perp}$: *1* — 10, *2* — 3, *3* — 1 (изотропный металл). b — слоистый кристалл с металлической проводимостью в плоскости слоев и полупроводниковыми (диэлектрическими) свойствами в перпендикулярном слоям направлении при $\varepsilon_{\parallel}^0/\varepsilon_{\perp}^0 = 2$ и $k_0/\varkappa_{\perp} = 0.01$. Значения $\varkappa_{\parallel}/\varkappa_{\perp}$: *1* — 0, *2* — 0.2, *3* — 0.6. c — цепочечный кристалл с металлической проводимостью вдоль цепочек при $\varepsilon_{\parallel}^0/\varepsilon_{\perp}^0 = 0.5$ и $k_0/\varkappa_{\perp} = 0.01$. Значения $\varkappa_{\parallel}/\varkappa_{\perp}$: *1* — 3, *2* — 10, *3* — 30.

имеет полупроводниковый характер (сопротивление растет с понижением температуры). Тогда экранирование вдоль z является слабым и $\varkappa_{\parallel} \ll \varkappa_{\perp}$. Такая анизотропия характерна, например, для монокристаллов типа $Bi_2Sr_2Ca_{n-1}Cu_nO_{2n+4}$, в которых расстояние между одиночными (при $n = 1$) проводящими слоями CuO_2 или между плотноупакованными «пакетами» из $n \geqslant 2$ слоев CuO_2, разделенных $n-1$ слоями ионов Ca, составляет $d > 10$ Å, а отношение продольной (вдоль z) и поперечной (в плоскости xy) эффективных масс достигает значений $m_{\parallel}^*/m_{\perp}^* \gtrsim 10^4$ [2].

Полагая для простоты $\varkappa_\parallel = 0$, из (8) получаем

$$\beta_\pm^2(k_\perp) = \frac{k_\perp^2}{2}\left(1+\frac{\varepsilon_\perp^0}{\varepsilon_\parallel^0}\right) \pm \sqrt{\frac{k_\perp^4}{4}\left(1+\frac{\varepsilon_\perp^0}{\varepsilon_\parallel^0}\right)^2 - k_\perp^2\frac{\varepsilon_\perp^0}{\varepsilon_\parallel^0}(k_\perp^2+\varkappa_\perp^2)}. \qquad (39)$$

Отсюда при $\varepsilon_\perp^0 \neq \varepsilon_\parallel^0$ следует, что при условии

$$k_\perp^2 < \tilde{k}_0^2 \equiv \frac{4\varkappa_\perp^2\varepsilon_\perp^0/\varepsilon_\parallel^0}{(1-\varepsilon_\perp^0/\varepsilon_\parallel^0)^2}. \qquad (40)$$

знак подкоренного выражения в (39) отрицателен, т.е. величины $\beta_\pm^2(k_\perp)$ являются комплексными. Это соответствует знакопеременному (осциллирующему) характеру проникновения электростатического поля поверхностных зарядов (диполей) вдоль z с экспоненциальным затуханием амплитуды при условии

$$k_0 \equiv \frac{2\pi}{d_0} < \tilde{k}_0. \qquad (41)$$

Заметим, что при $k_0 = \tilde{k}_0$, когда

$$\beta_\pm^2 \equiv \beta_0^2 = \frac{k_0^2}{2}(1+\varepsilon_\perp^0/\varepsilon_\parallel^0), \qquad (42)$$

зависимость амплитуды поля от z определяется выражением

$$a_1(k_0, z) = \frac{k_0^2 e^{-\beta_0 z}}{4\varepsilon_\parallel^0\beta_0^3}\left[\left(2+\frac{\varepsilon_\perp^0}{\varepsilon_\parallel^0}\right) + \left(1-\frac{\varepsilon_\perp^0}{\varepsilon_\parallel^0}\right)\beta_0 z\right]. \qquad (43)$$

Как видим, при $\varepsilon_\perp^0 > \varepsilon_\parallel^0$ функция (43) меняет знак в точке

$$z = z_0 \equiv \frac{\varepsilon_\perp^0 + 3\varepsilon_\parallel^0}{\beta_0(\varepsilon_\perp^0 - \varepsilon_\parallel^0)}. \qquad (44)$$

На рисунке, b показаны примеры таких осциллирующих зависимостей потенциала от z для разных значений параметров.

Следует подчеркнуть, что рассмотренные выше пространственные осцилляции электростатического потенциала обусловлены неоднородным перераспределением экранирующих электронов в знакопеременном поле периодически расположенных поверхностных зарядов (диполей) и не имеют ничего общего с так называемыми фриделевскими осцилляциями [6], которые определяются квантовыми свойствами электронов в металлах.

3) Ц е п о ч е ч н ы й к р и с т а л л. Рассмотрим сильно анизотропный цепочечный кристалл с металлической проводимостью вдоль цепочек и полупроводниковыми свойствами в поперечном направлении

($\varkappa_{\|} \gg \varkappa_{\perp}$). Если цепочки направлены перпендикулярно границе раздела сред $z = 0$, то при условии $\varkappa_{\perp} = 0$ из (8) следует, что на больших расстояниях $\beta_{-} \to 0$ (при $k_{\perp} \to 0$), так что второе слагаемое в (7) практически не затухает с ростом z, т.е. электростатическое поле может проникать на большую глубину, как показано на рисунке, *c*.

4) Б и к р и с т а л л $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$. Как показано в [4], вдоль высокоугловой границы раздела бикристалла $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ возникают почти периодическая система доменов двойникования и сеть краевых дислокаций несоответствия с периодом $d_0 \approx 100$ Å. Предполагая, что на таких структурных дефектах ионной решетки имеется периодическое распределение нескомпенсированных зарядов (или диполей), согласно полученным в разделе 1 выражениям (20)–(24), приходим к выводу о том, что полюса подынтегрального выражения (20) должны определять характер проникновения электростатических полей этих зарядов (диполей) в объем кристаллов $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$. В частности, если ось **b** в одном из типов анизотропных доменов двойникования составляет угол φ_0 с границей $x = 0$, то при условии

$$\operatorname{tg}^2 \varphi_0 < \frac{4\varepsilon\nu}{(\varepsilon\nu - 1)^2} \tag{45}$$

все корни уравнения (22), согласно (23), (24), будут комплексными. Это означает, что амплитуда знакопеременной части поля, осциллируя, затухает экспоненциально с ростом x в этих доменах. Если же выполняется условие

$$\frac{4\varepsilon\nu}{(\varepsilon\nu - 1)^2} < \operatorname{tg}^2 \varphi_0 < \frac{4\varkappa}{(\varepsilon - 1)^2}, \tag{46}$$

то «малые» корни (24) становятся реальными,[2] что означает появление незатухающих осциллирующих компонент поля $\sim \sin(k_0 x\, t_{3,4})$.

С другой стороны, в доменах второго типа, чередующихся с первыми, ось **b** составляет угол $\varphi_0 + \pi/2$ с границей $x = 0$, так что условие появления незатухающих решений в этом случае имеет вид

$$\frac{4\varepsilon\nu}{(\varepsilon\nu - 1)^2} < \operatorname{ctg}^2 \varphi_0 < \frac{4\varkappa}{(\varepsilon - 1)^2}. \tag{47}$$

Отсюда следует, что в секторах углов

$$\varphi_0 > \operatorname{arctg}\left(\frac{2\sqrt{\varepsilon\nu}}{\varepsilon\nu - 1}\right) \qquad \text{или} \qquad \varphi_0 < \operatorname{arctg}\left(\frac{\varepsilon\nu - 1}{2\sqrt{\varepsilon\nu}}\right) \tag{48}$$

глубина проникновения поля является макроскопически большой и сравнимой с продольными размерами доменов ($L_0 \approx 1000$ Å).

В настоящей работе показано, что электростатические поля неоднородно (периодически) распределенных поверхностных зарядов и диполей на границах раздела анизотропных (слоистых или цепочечных)

---

2 При $\operatorname{tg}^2 \varphi_0 > 4\varkappa(\varepsilon - 1)^{-2}$ становятся реальными также «большие» корни (23) уравнения (22) с $\varkappa \gg 1$.

кристаллов могут проникать при определенных условиях в объем кристаллов на макроскопически большую глубину, значительно превышающую характерное расстояние (период) между зарядами, благодаря своеобразному эффекту «дальнодействия» при анизотропной экранировке зарядов. Это может играть важную роль для электрополевого эффекта в высокотемпературных сверхпроводниках [3], обладающих слоистой структурой и сильной анизотропией физических свойств [1,2]. Благодаря преобладающей ионной связи в кристаллической решетке купратных МОС различные структурные дефекты, например скопления краевых дислокаций несоответствия на высокоугловых границах в бикристаллах [4] или на границах зерен (кристаллитов) в поликристаллах и керамиках, могут сопровождаться накоплением нескомпенсированных зарядов и дипольных моментов, что приводит к локальному перераспределению свободных носителей заряда (электронов, дырок) в проникающих на большие расстояния ($\lambda \gtrsim 1000\,\text{Å}$) электростатических полях и как следствие к изменению СП-свойств ВТСП-материалов (в частности, к понижению T_c и уменьшению критического тока j_c).

С другой стороны, через такие «слабые места» (границы раздела, микротрещины) может происходить более свободное проникновение внешних электрических полей, влияющих на T_c и j_c, т.е. усиление электрополевого эффекта.

В заключение выражаем благодарность проф. S.E.Babcock и проф. D.C.Larbalestier за полезные дискуссии и поддержку настоящих исследований, выполненных в Центре прикладной сверхпроводимости Университета штата Висконсин (Мэдисон, США).

Работа проводилась в рамках Программы научно-исследовательского проекта «Кулон», финансируемого Государственным комитетом по науке и технологии Украины (проект № 2.3/521).

Список литературы

[1] Высокотемпературные сверхпроводники / Под ред. Д. Нелсона, М. Уиттнахема и Г. Джорджа. М. (1988).
[2] Физические свойства высокотемпературных сверхпроводников / Под ред. Д.М. Гинсберга. М. (1991).
[3] Mannhart J., Bednorz J.G., Frey T. Proc. TU-C2 on the 4th Intern. Conf. M^2S-HTSC. Grenoble (France) (July 1994). P. 11.
[4] Babcock S.E., Larbalestier D.C. J. Mater. Res. **5**, 919 (1990).
[5] Романов Ю.А. ЖЭТФ, **47**, 2119 (1964).
[6] Габович А.М., Ильченко Л.Г., Пашицкий Э.А., Романов Ю.А. ЖЭТФ **75**, 249 (1978); Surf. Sci. **94**, 179 (1980).
[7] Ильченко Л.Г., Пашицкий Э.А., Романов Ю.А. ФТТ **22**, 2700 (1980); Surf. Sci. **121**, 375 (1982).
[8] Ильченко Л.Г., Пашицкий Э.А. ФТТ **25**, 1744 (1983).
[9] Ильченко Л.Г., Саван В.А. Препринт ИТФ АН Украины. Киев (1993).
[10] Винецкий В.Л., Пашицкий Э.А. ФТТ **25**, 1744 (1983).
[11] Винецкий В.Л., Пашицкий Э.А., Янчук В.А. ЖСХ **27**, 181 (1986).