Письма в ЖЭТФ, том 39, вып. 10, стр. 466 – 469 *25 мая 1984 г.*

ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ НА ПОВЕРХНОСТИ КВАНТОВОГО КРИСТАЛЛА

С.В.Иорданский, С.Е.Коршунов

Исследована квантовая модель поверхности кристалла. Построена фазовая диаграмма. Сформулирована и исследована модель границы раздела квантового кристалла и квантовой жидкости, учитывающая движение жидкости.

Широкий интерес к исследованию поверхности квантовых кристаллов, наблюдаемый в последние годы, в значительной степени стимулирован работой Андреева и Паршина [1], в которой наряду с предсказанием волн плавления была выдвинута гипотеза о возможности существования квантово-шероховатых граней при нуле температур. Это предположение было подвергнуто критике Фишером и Виксом [2], исходившими из полуфеноменологических соображений.

Простейшая модель квантовой границы раздела, соответствующая одинаковой плотности твердой и жидкой фазы, была построена и исследована Фрадкиным [3] и авторами настоящей работы [4]. Было показано, что при нуле температур грань находится в гладком состоянии, а изменение температуры перехода в шероховатое состояние T_R, обусловленное квантовыми эффектами, является небольшим.

Настоящая работа посвящена исследованию более реалистичных моделей, описывающих: 1) свободную поверхность квантового кристалла (существующего при нулевом давлении) и 2) границу раздела квантового кристалла и квантовой жидкости.

Квантовая модель свободной поверхности кристалла была сформулирована в работе Фрадкина [3] и описывается гамильтонианом:

$$H = \sum_{(jj')} \left[\frac{J}{2}(\hat{n}_j - \hat{n}_{j'})^2 - \mu\cos(\phi_j - \phi_{j'})\right];\ \hat{n}_j = -i\frac{\partial}{\partial\phi_j}, \tag{1}$$

где суммирование ведется по парам ближайших соседей на плоской решетке, а угловые переменные ϕ_j являются сопряженными по Фурье к целочисленным переменным n_j, представляющим собой высоты поверхности. Первый член в (1) есть энергия, связанная с разностью высот в соседних точках поверхности, а второй описывает перескоки атомов вдоль поверхности (увеличение n_j на единицу в одном узле с одновременным уменьшением на единицу в соседнем).

Фрадкин исследовал модель типа синус-Гордон, совпадающую по симметрии с (1), и показал, что при $T = 0$ поверхность является гладкой, а T_R в главном порядке не зависит от μ [3].

Отметим, что гамильтониан (1) обладает не только дискретной симметрией, связанной со сдвигом всех n_j, но и непрерывной симметрией, связанной с поворотом всех ϕ_j. Отсюда следует, что помимо перехода из шероховатого в гладкое состояние (представляющего собой спонтанное нарушение первой из указанных симметрий) в рассматриваемой модели так же может происходить фазовый переход, связанный с нарушением непрерывной симметрии. Его наличие становится очевидным при $J = 0$, когда гамильтониан (1) превращается в гамильтониан классической XY-модели.

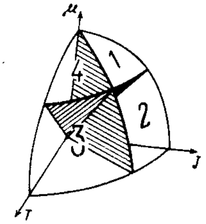
Рассмотрим теперь случай нуля температур. При $\mu \ll J$, используя теорию возмущений, нетрудно показать, что возбужденные состояния отделены от основного щелью шириной $(z/2)[J - \mu + O(\mu^2/J)]$ (z – число ближайших соседей).

В обратном пределе $\mu \gg J$ мы можем, используя метод, описанный в работе [4], перейти к разреженному кулоновскому газу инстантонов, что позволит нам найти гриновскую функцию (коррелятор) для колебаний поверхности $G(\mathbf{k}, \omega) = \langle n_{\mathbf{k}\omega} n^*_{\mathbf{k}\omega}\rangle$. В самосогласованном приближении (работающем тем точнее, чем больше отношение $\kappa = \mu/J$) при малых k

$$G(\mathbf{k}, -i\omega) = \frac{\hbar}{J(\xi^{-2} + k^2) + (\mu k^2)^{-1}\omega^2}, \tag{2}$$

где импульс k измеряется в единицах обратных длин решетки a^{-1}, а $\xi^{-2} \propto \exp\left(-\frac{c_1}{2}\sqrt{\frac{\mu}{J}}\right)$ пропорционально плотности инстантов. Из вида (2) следует, что длинноволновые колебания поверхности имеют бесщелевой спектр (линейный при малых k). Заметим, что отсутствие щели в спектре отнюдь не означает того, что поверхность находится в шероховатом состоянии. Как показано в [4] для моделей вида (1), энергия ступени определяется коррелятором на нулевой частоте и в случае коррелятора вида (2) пропорциональна J/ξ.

Различный вид спектра в различных областях по κ позволяет сделать вывод о наличии фазового перехода при критическом значении κ_c. Изучение корреляторов $\langle\cos(\phi_j - \phi_l)\rangle$ при $|\mathbf{r}_j - r_l| \to \infty$ в предельных случаях $\kappa \gg 1$ и $\kappa \ll 1$ позволяет заключить, что это тот же самый переход, что и в XY-модели (т.е. при $J = 0$, $T \neq 0$). В XY-модели фазовый переход происходит при обращении в ноль свободной энергии вихря. В случае $J \neq 0$ возможность фазового перехода даже при нуле температур может быть объяснена тем, что вихрь притягивает инстантоны, и при понижении κ суммарная энергия взаимодействия с инстантонным газом (логарифмически расходящаяся) может компенсировать собственную энергию вихря (также логарифмически расходящуюся).



Фазы (4, 3) являются шероховатыми, фазы (1, 2) – гладкими. Фазы (1, 4) соответствуют конечной сверхтекучей плотности и могут иметь бездиссипативные потоки массы вдоль поверхности кристалла

Таким образом, поверхность фазовых переходов, начинающаяся на прямой в плоскости (T, μ) заканчивается на прямой в плоскости (J, μ). Один из возможных видов фазовой диаграммы изображен на рисунке. Фазы 1 и 2 – гладкие, 3 – 4 – шероховатые. Фазы 1 и 4 являются сверхтекучими, т.е. возможен бездиссипативный поток массы вдоль поверхности, определяемой $\vec{\nabla}\phi$, с конечной сверхтекучей плотностью ρ_S. Не исключено, что линия существования четырех фаз в действительности распадается на две тройные линии.

Перейдем теперь к квантовому описанию границы раздела между твердой и жидкой сверхтекучей фазами. Рассматривавшаяся в [4] модель такой границы применима в случае одинаковых плотностей обеих фаз. Для построения общей модели необходимо учесть наличие у амплитуды перехода атомов из одной фазы в другую фазового множителя, зависящего от фазы конденсата в жидком ^{4}He. Предполагая, что связь фаз линейна,мы получим гамильтониан

$$H=\frac{J}{2}\sum_{(jj')}(n_j-n_{j'})^2-\mu\sum_j\cos(\phi_j-\lambda\chi_j)+\int[\rho_L\frac{\hbar^2}{2m^2}(\vec{\nabla}\chi)^2+\frac{c^2}{2\rho_L}(\delta\rho)^2]\,dV, \quad (3)$$

где χ_j – значение фазы конденсата в узле j на поверхности раздела (считая, что χ мало меняется в пределах ячейки); и $\delta\rho, \chi$ образуют пару гамильтоново сопряженных величин. Объемный интеграл дает энергию жидкости; c, ρ_L – соответственно скорость звука и плотность жидкости, m – масса атомов ^{4}He. Закон сохранения вещества на границе раздела однозначно определяет величину $\lambda=(\rho_S-\rho_L)/\rho_S$, где ρ_S – плотность твердой фазы.

Второй член в гамильтониане имеет простой физический смысл: при переходе атома из кристалла происходит увеличение плотности жидкости только на величину $\Delta\rho=\rho_S-\rho_L$, так как одновременно сдвигается ее граница.

В случае малых μ, как и в предыдущей модели можно воспользоваться теорией возмущений и показать, что спектр возбуждений имеет щель. При достаточно больших μ мы можем использовать метод перевала, перейти к разреженному инстантонному газу и найти функцию Грина

$$G(\mathbf{k},-i\omega)=\frac{\hbar}{J(\xi^{-2}+k^2)+[\hbar^2\mu^{-1}+\rho_{ef}(k^2+\omega^2/c^2)^{-1/2}]\,\omega^2}\ ;\ \rho_{ef}=\frac{(\Delta\rho)^2m^2}{\rho_L\rho_S^2\,a} \qquad (4)$$

полюса которой определяют спектр возбуждений поверхности, который является бесщелевым и при $k\to 0$ приближается снизу к спектру звуковых волн в жидкости $\omega=ck$. Отметим, что в пределе $\xi^{-2}\to 0$ (исчезающая плотность инстантонов). этот спектр переходит в $\omega\propto k^{3/2}$ совпадающий со спектром волн плавления [1].

Различный вид спектра в зависимости от величины μ позволяет сделать вывод о наличии фазового перехода в этой модели (при нулевой температуре), не совпадающего с переходом в шероховатую фазу. Таким образом, в рассматриваемых моделях, нуль температуры соответствует гладкому состоянию с конечной энергией ступени, в согласии с результатами предыдущих работ [2-4]. Несмотря на это при частотах квантовых переходов, бóльших некоторой критической, происходит фазовый переход другой природы и появляются бесщелевые возбуждения типа волн плавления.

Авторы благодарны А.Ф.Андрееву и П.Б.Вигману за полезные обсуждения.

Литература

1. *Андреев А.Ф., Паршин А.Я.* ЖЭТФ, 1978, 75, 1511.
2. *Fisher D.S., Weeks J.D.* Phys. Rev. Lett., 1983, **50**, 1073.
3. *Fradkin E.* Phys. Rev., 1983, **B 28**, 5338
4. *Иорданский С.В., Коршунов С.Е.* Письма в ЖЭТФ, 1983, 38, 542; ЖЭТФ, 1984, 87, (в печати).

Институт теоретической физики
им. Л.Д.Ландау
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
5 апреля 1984 г.