Письма в ЖЭТФ, том 38, вып.11, стр. 542 – 544 *10 декабря 1983 г.*

КВАНТОВЫЕ ЭФФЕКТЫ В ПЕРЕХОДЕ ОГРАНЕНИЯ

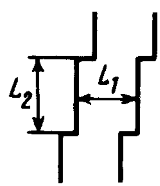
С.В.Иорданский, С.Е.Коршунов

Построена квантовая модель межфазной границы раздела между кристаллом и сверхтекучей жидкостью. Показано, что квантовые эффекты не могут вызвать перехода граней и шероховатое состояние при абсолютном нуле.

Термодинамическая модель, описывающая переход кристаллической грани из гладкой в шероховатую фазу, была сформулирована впервые в работе Франка, Бартона и Кабреры [1]. Позже было показано, что эта модель, аналогична по своим свойствам двумерной XY-модели [2]. В этой модели энергия грани зависит исключительно от ее конфигурации, т.е. от ее потенциальной энергии $U(\{n_k\})$, где n_k высота поверхности под каким-то уровнем измеряемая в дискретных единицах порядка постоянной решетки, k – индекс узла двумерной решетки на грани. При температуре равной нулю реализуется минимум U, соответствующий $n_k = \mathrm{const}$ и любая грань, согласно этой модели является гладкой.

Предположение о том, что квантовые эффекты могут привести к существованию шероховатых граней при нуле температуры, было сформулировано Андреевым и Паршиным [3]. В недавно появившейся теоретической работе Фишера и Викса [4] это предположение поставлено под сомнение. Аргументация состоит в том, что средний квадрат нулевых колебаний поверхности сходится, в силу чего ее положения не могут не чувствовать атомной структуры, а потому U меняется скачками.

Настоящая работа посвящена формулировке и исследованию физической квантовой модели для границы между твердым и сверхтекучим He_4.



Из-за туннелирования атомов гелия из жидкости на поверхность кристалла и обратно в гамильтониане системы имеется матричный элемент, описывающий переходы между различными конфигурациями поверхности. Мы ограничимся переходами, меняющими число атомов на единицу, причем будем считать, что величина этого матричного элемента не зависит от самой конфигурации. Это предположение является хорошим приближением для грани с большими индексами Миллера, которая в классическом приближении может быть описана как совокупность изломанных ступеней с большим расстоянием между изломами L_1, L_2 (рис.1), так как в этом случае туннелирование в основном происходит на изломах. Волновую функцию Ф-системы мы будем предполагать зависящей исключительно от состояния поверхности, определяемого числами n_k и состояния сверхтекучей жидкости, определяемого потенциалом скоростей жидкости $\psi(x)$.

Из-за наличия бозе-конденсата в жидком He_4 можно не заботиться о точном выполнении закона сохранения числа частиц, так что часть гамильтониана, описывающую изменение конфигурации поверхности можно взять в виде

$$H_T = \sum_k \hat{\mu}_{0k} + \hat{\mu}_{1k} \left.\frac{\partial\psi}{\partial\nu}\right|_k + \text{h.c.}, \tag{1}$$

где матрицы $\hat{\mu}_{0k}$, $\hat{\mu}_{1k}$ имеют только элементы с изменением $n_k \to n_{k+1}$. $\hat{\mu}_{0k}$ соответствует переходу в конденсат без возмущения состояния жидкости, $\hat{\mu}_{1k}$ соответствует взаимодействию с гидродинамическими модами жидкости, причем мы оставили только член с нормальной составляющей скорости $\left.\frac{\partial\psi}{\partial\nu}\right|_k$ на границе жидкости, считая прочие переменные несущественными.

В гамильтониане нужно помимо H_T, учесть энергию жидкости и энергию конфигурации поверхности, которую мы запишем в виде квадратичной функции высот n_k, что так же является хорошим приближением для грани с большими индексами Миллера, а качественно годится для описания любой грани [2].

В дальнейшем мы будем рассматривать случай $\hat{\mu}_{0k} \neq 0$, $\hat{\mu}_{1k} \equiv 0$ и только в конце скажем какие отличия возникают в обратном случае $\hat{\mu}_{0k} \equiv 0$, $\hat{\mu}_{1k} \neq 0$. Удобно считать $\Phi(n)$ фурье образом периодической функции $\Phi(\phi)$, так что гамильтониан примет вид

$$H = \sum_{k,k'} U_{kk'} (p_k - p_{k'})^2 + \mu_0 \sum_k \cos\phi_k, \quad p_k = -i\frac{\partial}{\partial\phi_k}, \quad \mu_0 > 0. \tag{2}$$

Ультраквантовой ситуации отвечает случай $\mu_0 \gg |U_{kk'}| \sim U$, когда существенны только ϕ_k вблизи минимума косинуса. Диагонализуя соответствующий квадратичный гамильтониан, мы получим бесщелевой „фононный" спектр при малых волновых векторах $\omega_q \approx$ $\approx cq$. Однако, мы должны учесть наличие многих минимумов, так как полученный результат имеет только нулевой порядок по интегралу перекрытия (приближение сильной связи).

Для выяснения характера спектра мы исследовали фейнмановскую амплитуду перехода $Z(\phi, \phi', \theta)$ на торе $(0 \leqslant \phi_k \leqslant 2\pi)$ за большое мнимое время θ (см. например, [5]):

$$Z(\phi,\phi'\ \theta) = \sum_{m_{k,j}} \int_0^{2\pi} d\phi_{k,j} \int_{-\infty}^{\infty} dp_{kj} \exp\left\{ \sum_k 2\pi i m_{kj}\, p_{kj} - i p_{kj}(\phi_{k,j+1} - \phi_{kj}) - H(p_{kj}, \phi_{kj})\tau \right\}, \tag{3}$$

где введено дискретное время θ_j с малым шагом τ, m_{kj} – целые. Для больших μ_0, используя метод перевала, можно получить следующее выражение для амплитуды перехода:

$$Z \approx Z_0 \sum_{m_{kj}} \exp\left\{-\sum_{k,j,k',j'} m_{kj} m_{k'j'} G(\mathbf{R}_{kj} - \mathbf{R}_{k'j'})\right\}, \tag{4}$$

где G – функция Грина на пространственно-временной решетке, соответствующая разложению гамильтониана около минимума, Z_0 – фононная статсумма. Нетрудно показать, что $G(0) \sim \sqrt{\mu_0/U}$, $G(R) \sim 1/R$ при больших R. Таким образом мы имеем статсумму кулоновского газа „инстантонов" с малой плотностью $n_0 \sim \exp[-G(0)]$. Согласно теории Дебая – Хюккеля корреляционные функции такого газа опадают экспоненциально с большим, но конечным радиусом $R_c \sim \exp[\,^1/_2\, G(0)]$, что соответствует щели в спектре элементарных возбуждений $\omega_q^2 = c^2(R_c^{-2} + q^2)$ и гладкости грани. Подобно XY-модели, существует несколько модифицированная модель для которой разделение (4) является точным.

В случае, когда в (1) $\hat{\mu}_{0k} \equiv 0$, $\hat{\mu}_{1k} \neq 0$, мы получим точно такие же результаты с соответствующей функцией Грина G. Энергия возбуждений для малых q имеет вид $\omega_q^2 = c^2 R_c^{-2} + \alpha q^3$ и величина $c^2 R_c^{-2}$ экспоненциально мала, при большой величине $|\mu_{1k}|$.

Таким образом, мы показали , что для рассматриваемых моделей любая грань кристалла (характеризуемая своими параметрами U, μ) будет абсолютно гладкой при нулевой температуре, несмотря на сильные квантовые эффекты (за исключением тривиального случая $U \equiv 0$) в соответствии с качественным утверждением работы [4].

Отметим, что сходимость или расходимость квадрата нулевых колебаний сама по себе не играет роли. В настоящих моделях это так из-за того, что инстантоны являются заряженными и в одномерной пространственной решетке соответствующее действие становится бесконечным и экранировка при больших μ отсутствует. Однако, вообще говоря возможны модели, для которых и в трехмерном случае действие конечно только для инстантонов с суммарным зарядом равным нулю и экранировки нет.

Авторы выражают благодарность А.Ф.Андрееву за полезные дискуссии.

Литература

1. *Burton W.K., Cabrera N., Frank F.C.* Phil. Trans. Roy. Soc. London, 1951, **243A**, 299.
2. *Chui S., Welks J.D.* Phys. Rev., 1976, **B14**, 4978.
3. *Андреев А.Ф., Паршин А.Я.* ЖЭТФ, 1978, **75**, 1511.
4. *Fisher D.S., Weeks J.D.* Phys. Rev. Lett., 1983, **50**, 1073.
5. *Kogut J.B.* Rev. Mod. Phys., 1979, **51**, 659.

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

Поступила в редакцию
31 октября 1983 г.