

О ПОВЕРХНОСТИ РАЗДЕЛА В ПРОБЛЕМЕ РАВНОВЕСНОЙ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ

Л.А.Большов, В.Л.Покровский, Г.В.Уймин

Рассмотрено влияние квантовых и тепловых флуктуаций на упорядочение вицинальных граней на поверхности раздела жидкий – твердый гелий. Обсуждаются следствия этого упорядочения, интересные для эксперимента.

Хотя проблема равновесной кристаллизации была поставлена Вульфом ¹ (см. также ²) еще в начале века. единственный экспериментальный объект, для которого эта теория применима, появился совсем недавно. Это поверхность раздела жидкого и твердого гелия, экспериментальные исследования ³⁻⁵ которой были инициированы работой Андреева и Паршина ⁶. Авторы работы ⁶ использовали фактически бездиссипативный характер плавления при низких температурах и построили гидродинамическую теорию движения поверхности. Остается, однако, вопрос о микроструктуре поверхности и ее фазовой диаграмме. В настоящей работе обобщена теория кристаллической огранки, данная Ландау ⁷ для $T = 0$ и простейших граней, на случай более сложной геометрии и $T \neq 0$. Важный вопрос, дискутировавшийся в последнее время ⁸⁻¹⁰ состоит в следующем: могут ли квантовые флуктуации сделать поверхность шероховатой при $T = 0$. Мы исходим из модели вицинальной по отношению к $(0, 0, 1)$ грани, построенной с помощью ступенек единичной высоты. Для упрощения вместо гексагонального кристалла рассмотрим кубический.

Квантовая модель одиночной ступеньки описывается спиновым ($S = 1$) гамильтонианом:

$$\mathcal{H} = \sum_m \left\{ -\lambda (S_m^+ S_{m+1}^- + S_m^- S_{m+1}^+) + \Delta (S_m^z)^2 - h S_m^z + V(n) S_m^z S_{m+n}^z \right\}, \quad (1)$$

где m нумерует узлы решетки вдоль ступеньки, проекции $S^z = \pm 1$ соответствуют перегибам разных направлений, а проекция $S^z = 0$ отвечает отсутствию перегиба на ступеньке. Величина λ равна амплитуде "прилипания" частицы к ступеньке или уходу с нее. Δ – энергия одиночного перегиба. Поле h регулирует ориентацию ступеньки, а $V(h)$ – энергия взаимодействия перегибов. На рис. 1 показана диаграмма состояний модели, описываемой гамильтонианом (1). В заштрихованной области ступенька упорядочена, т. е. закреплена определенной долиной потенциального рельефа. В случае большой квантовости $\lambda/\Delta \gg 1$ ступенька диффузионно размыта, а ее флуктуационное смещение на длине L

$$\langle u^2 \rangle \approx \frac{a}{4\pi} \frac{\hbar}{Ms} \ln \left(\frac{L}{a} \right). \quad (2)$$

Формулу (2) можно также истолковать, как среднее смещение одномерной струны, имеющей преимущественную ориентацию, под действием нулевых колебаний. Это позволяет придать смысл множителям перед логарифмом: M – масса атома гелия, s – скорость "звука" вдоль струны.

В системе ступенек со средним расстоянием l между ними величину L в (2) следует заменить на l . Эти нулевые колебания невелики. Оценка множителя перед L в логарифме в (2) дает значение

$$\sim 0,1 a^2 T_\lambda / \theta_D,$$

где T_λ — температура λ -перехода, а θ_D — дебаевская температура. Наши простые оценки подтверждают заключение работ ⁸⁻¹⁰ о далеком порядке в рассматриваемой системе при $T = 0$. При небольших колебаниях ступенек объем кристалла играет роль периодического потенциала V_0 для ступеньки. При $T = 0$ эта система может быть закреплена периодическим потенциалом. Возможен, однако, переход к незакрепленному состоянию (депиннинг). Причина его заключается в классическом взаимодействии ступенек. Роль квантовых флуктуаций сводится к ренормировке периодического рельефа. В предположении о гауссовом характере распределений смещений при нулевых колебаниях, получим для ренормировки потенциала:

$$\frac{V_R}{V_0} \sim \exp\left(-\frac{2\pi^2}{a^2} \langle u^2 \rangle\right) = (a/l)^{(\pi/2)(T_\lambda/\theta_D)}.$$

Взаимодействие убывает степенным образом (см. ⁷ и ¹¹)

$$U(l) \sim (a/l)^\Delta \quad (\Delta \geq 2).$$

Для устойчивости соизмеримой с объемом структуры необходимо, чтобы

$$V_R \geq U''(l).$$

При $T_\lambda/\theta_D < 1$ это заведомо выполняется для больших l . Таким образом, мы показали, что вблизи устойчивой при $T = 0$ грани вицинальные грани также устойчивы. Наши рассуждения справедливы для вицинальных граней вида (k, m, n) , причем $k \ll m \ll n$.

При $T = 0$ задача об оптимальном расположении степенным образом взаимодействующих ступеней на вицинальной грани $(0, m, n)$ ($m \ll n$) эквивалентна задаче о структуре 1D взаимодействующего решеточного газа при заданной концентрации частиц $c = m/n$. Последняя была решена в работах ^{12, 13}. Другая постановка задачи о решеточном газе с заданным химическим потенциалом μ использовалась в работах ^{14, 15}. Нас интересует именно такая постановка задачи, так как в случае поверхности раздела роль, аналогичную химическому потенциалу, выполняет расстояние от стенки сосуда. Приведем результат ее решения.

На оси μ каждому рациональному c соответствует конечный отрезок

$$\Delta\mu(c) \sim d^2 U/dp^2 \Big|_{p=1/c}$$

Эти значения $\Delta\mu$ пропорциональны размерам плоских участков огранки, обладающих периодом p . Совокупность этих отрезков плотно заполняет всю ось μ ¹⁵. Иерархию периодических фаз, возникающих в огранке, можно описать, как ветвящуюся последовательность. Она начинается с главной последовательности вида $\langle n \rangle \equiv (0, 1, n)$. Каждая бифуркация происходит по правилу: между двумя соседними фазами $\langle A \rangle$ и $\langle B \rangle$ ветвящейся последовательности возникает димерная фаза $\langle AB \rangle$, которая при следующей бифуркации является соседней для фаз $\langle A \rangle$ и $\langle B \rangle$.

Из-за конечности размера поверхности раздела не все грани могут существовать даже при $T = 0$. Необходимо, чтобы размер участка, пропорциональный $\Delta\mu$, был больше периода структуры. Оценка показывает, что максимально возможная периодичность не превышает $20 \div 30$ постоянных решеток.

Для любой конечной температуры в производной поверхностной энергии $dE/dc = \mu(c)$ остается лишь конечное число скачков. Это означает, что в огранке чередуются гладкие и

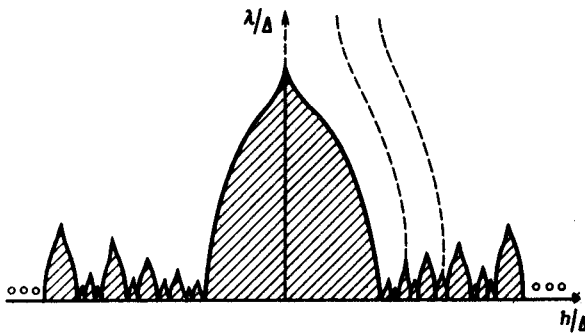


Рис. 1. Фазовая диаграмма, описываемая гамильтонианом (1). Пунктиром показаны линии постоянно-го наклона ступенек

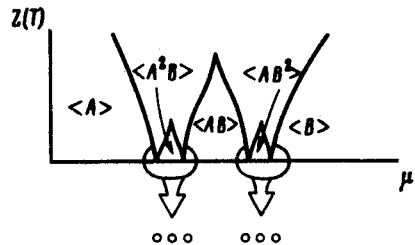
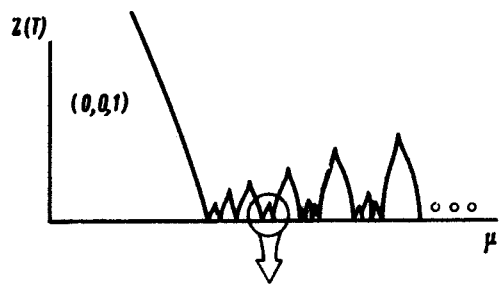


Рис. 2. Фазовая диаграмма статистической 2D системы ступенек. В нижней части рисунка показана тонкая структура фазовой диаграммы

шероховатые участки. Решать задачу при $T \neq 0$ удобно методом трансфер-матрицы, аналогично тому, как это делалось в ¹⁶. Метод трансфер-матрицы сводит задачу о статистике системы ступенек к исследованию основного состояния 1D квантового гамильтониана. Роль оси времени при этом играет среднее направление ступенек, а сами ступеньки трактуются, как мировые линии фермионов. Фазовая диаграмма в переменных $\mu, Z = \exp(-E_0/T)$ дана на рис. 2. Она переходит при $T \rightarrow 0$ в бифуркационную последовательность, описанную выше. Между двумя соседними фазами $\langle A \rangle$ и $\langle B \rangle$ при $Z < \min(Z_{\langle A \rangle}^c, Z_{\langle B \rangle}^c)$ ($Z_{\langle A \rangle}^c$ — критическое значение Z упорядочения структуры $\langle A \rangle$) существует несоизмеримая фаза. При фиксированном "времени" пространственное расположение ступенек выглядит, как неупорядоченная последовательность периодов A и B с фиксированной их концентрацией. При понижении температуры в этой последовательности возникает упорядочение: образуется димерная фаза $\langle AB \rangle$ с периодом $l_{AB} = l_A + l_B$. Критическое поведение димерных фаз универсально и описывается формулами

$$T_{\langle AB \rangle}^c Z_{\langle AB \rangle}^c = \frac{1}{2} \frac{d^2 U}{dp^2} \Big|_{p=l_{AB}} \quad (3)$$

$$\Delta\mu_{\langle AB \rangle} = 4\pi l_{AB} \frac{d^2 U}{dp^2} \Big|_{p=l_{AB}} \exp\left(-\frac{\pi^2}{2\sqrt{2} \sqrt{(Z_{\langle AB \rangle}^c - Z)/Z_{\langle AB \rangle}^c}}\right) \quad (4)$$

Критическое поведение главной последовательности $\langle n \rangle \equiv (0, 1, n)$ качественно не отличается от описанного выше.

Приведем также формулу для поверхностной энергии, справедливую в температурной области $Z_{\langle n, n+1 \rangle}^c \lesssim Z \lesssim Z_{\langle n \rangle}^c$

$$E(c = \text{tg}\theta) = \text{tg}\theta \left((n+1) U(n) - n U(n+1) + \epsilon_1 - 2TZ \frac{\sin \pi \{ \text{ctg} \theta \}}{\pi} \right), \quad (5)$$

где $\{X\}$ — дробная часть X , ϵ_1 — энергия образования ступеньки (5). Скачок $\Delta\mu$, оп-

ределяющий пространственные размеры фазы $\langle n \rangle$ определяется из (5) и равен

$$\Delta\mu(c = 1/n, T) = \Delta\mu(c = 1/n, T = 0) - 4nTZ(T). \quad (6)$$

Полученные значения температур перехода $T_{<A>}^c$ (см. (3)) для степенного взаимодействия $\sim (\ln l_A)^{-1}$. Пока на поверхности раздела в гелии найдены лишь главные грани. Экспериментальное обнаружение Вольфом и др. ¹⁷ 60-градусной грани, обладающей температурой упорядочения $T_0 \sim 0,3\text{K}$ дает возможность оценить температуру упорядочения vicинальных граней вблизи $(0, 0, 1)$:

$$T \sim T_0 / \ln l \lesssim 0,1\text{K}.$$

Наблюдение резких особенностей типа (4) в экспериментах ¹, использующих оптику, затруднительно, так как уже при $(T_c - T)/T_c \sim 1/50$ происходит выход на оптический предел разрешимости $\sim 1\text{ мкм}$.

Большая часть результатов, полученных нами, относится к случаю цилиндрической геометрии в поле силы тяжести. Предполагается, что ось цилиндра горизонтальна. Оказывается, что задача об определении формы поверхности раздела может быть решена аналитически (см. также ¹⁸). Форма равновесной поверхности зависит от безразмерных параметров, каковыми являются краевые углы и величина

$$G = \gamma^{-1} g \Delta\rho L^2,$$

где g — ускорение силы тяжести, $\Delta\rho$ — разность плотностей жидкого и твердого гелия, γ — поверхностное натяжение на границе раздела, а L — ее линейный размер. Располагая подходящим образом оси зародыша, можно добиться увеличения площади фиксированной грани в \sqrt{G} раз.

Краевой угол является разрывной функцией угла между осью кристалла и поверхностью стенки. Число разрывов и их величина уменьшаются с ростом температуры. Этот эффект можно было бы наблюдать, поворачивая цилиндр вокруг его оси.

Авторы благодарны А.Ф.Андрееву, К.О.Кешишеву и А.Я.Паршину за полезную дискуссию.

Подробности вычислений будут опубликованы позднее.

Литература

1. Wulff G. Z. Kristallogr. und Mineralogie, 1901, 34, 449.
2. Herring C. Phys. Rev., 1951, 82, 87.
3. Кешишев К.О., Паршин А.Я., Бабкин А.В. Письма в ЖЭТФ, 1979, 30, 63.
4. Avron J.E., Balfour L.S., Kuper C.G., Landau J., Lipson S.G., Shulman L.S. Phys. Rev. Lett., 1980, 45, 814.
5. Balibar S., Castaing B. J. Physique Lett., 1980, 41, L 329.
6. Андреев А.Ф., Паршин А.Я. ЖЭТФ, 1978, 75, 1511.
7. Ландау Л.Д. В сборнике, посвященном 70-летию академика А.Ф.Иоффе, изд. АН СССР, стр. 44, 1950.
8. Fisher D.S., Weeks J.D. Phys. Rev. Lett., 1983, 50, 1077.
9. Fradkin E. Phys. Rev., B, 1983, 28, 5338.
10. Иорданский С.В., Коршунов С.Е. Письма в ЖЭТФ, (в печати).
11. Марченко В.И. Письма в ЖЭТФ, 1982, 35, 459.
12. Hubbard J. Phys. Rev., B, 1978, 17, 494.
13. Pokrovsky V.L., Uimin G.V. J. Phys., 1978, C11, 3535.
14. Bak P., Bruinsma R. Phys. Rev. Lett., 1982, 49, 249.
15. Бурков С.Е., Синай Я.Г. УМН, 1983, 38, 205.
16. Uimin G.V., Pokrovsky V.L. J. Physique Lett., 1983, 44, L865.

17. *Wolf P.E., Balibar S., Gallet F.* Phys. Rev. Lett., 1983, **51**, 1366.

18. *Автон J.E., Balfour L.S., Zia R.* J. Stat. Phys. (в печати)

Институт теоретической физики

им. Л.Д.Ландау

Академии наук СССР

Поступила в редакцию

29 декабря 1983 г.
