

К ТЕОРИИ КОГЕРЕНТНОЙ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ БОЗЕ-ЖИДКОСТИ

А. Н. Козлов, *О. А. Козлова**, *Л. А. Максимов*

*Российский научный центр «Курчатовский институт»
123182, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 12 декабря 2005 г.

Рассматриваются два варианта описания когерентного роста кристалла при нулевой температуре. В первом варианте бездиссипативный переход вещества из одной фазы в другую трактуется как механическое движение системы, состоящей из двух однородных квазиодномерных бозе-конденсатов, один из которых моделирует кристаллическую фазу, а другой — сверхтекучий гелий. В этой модели вместо классического закона теории необратимых процессов, в которой скорость роста кристалла V пропорциональна первой степени неравновесности $\delta\mu$, выполняется закон $V \propto \sqrt{\delta\mu}$. Во втором варианте рассматривается микроскопическая модель роста кристалла, обусловленного квантовым туннелированием через межфазную поверхность, которая представляет собой структуру из двух соседних квазиодномерных квантовых ям.

PACS: 67.40.Bz, 67.40.Pm, 68.35.Ct, 61.72.Ji

1. ВВЕДЕНИЕ

Кинетика роста кристалла He^4 интенсивно изучалась в последнее время после теоретического предсказания Андреевым и Паршиным [1] квантового состояния атомно-шероховатых поверхностей кристаллов гелия и экспериментального обнаружения Кешишевым, Паршиным и Бабкиным [2] следствия этого явления — кристаллизационных волн.

Рассмотрим систему кристалл–поверхность–сверхтекучий гелий при конечной температуре. Согласно представлениям, развитым в [1], структура поверхности кристалла He^4 является квантовым аналогом классической атомно-шероховатой поверхности, т.е. представляет собой двумерную квантовую жидкость, состоящую из делокализованных ступеней различных конфигураций.

Для большинства граней, за исключением нескольких наиболее плотно упакованных, эта жидкость существует и при нулевой температуре. Если грань находится в нормальном состоянии, то рост кристалла представляет собой диссипативный процесс, и скорость роста мала. Если грань в сверхтекучем состоянии, то, вообще

говоря, возможно бездиссипативное движение сверхтекучей компоненты вдоль всей системы квантовый кристалл–поверхность–жидкость (при достаточно низких температурах можно пренебречь процессами переброса в столкновениях фононов кристалла [3]). В этом случае скорость роста велика. Этим, по-видимому, можно объяснить резкое увеличение скорости роста кристалла при пересыщениях, больших некоторого граничного, которое наблюдалось в экспериментах [4, 5].

Главным моментом теории кристаллизации сверхтекучей жидкости [3] является предположение о том, что скорость V роста поверхности кристалла пропорциональна степени неравновесности систем

$$V \sim \mu_{\text{crystal}} - \mu_{\text{liquid}}. \quad (1)$$

Этот вид зависимости является частным случаем теории необратимых процессов и не обязан выполняться, если кристаллизация не сопровождается диссипацией. В частности, этот закон не следует из теории квантового зародышеобразования [6–9].

В настоящей работе предлагаются два варианта описания когерентного роста кристалла в бозе-системе при нулевой температуре. В первом, полупереносологическом подходе, бездиссипативный переход вещества из одной фазы в другую трактуется как механическое движение системы, состо-

*E-mail: olga086@mail.ru

ящей из двух однородных квазиодномерных бозе-конденсатов, один из которых моделирует кристаллическую фазу, а другой — сверхтекучий гелий. В этой модели вместо соотношения (1) выполняется закон

$$V^2 \sim \mu_{crystal} - \mu_{liquid}. \quad (2)$$

Во втором варианте рассматривается микроскопическая модель роста кристалла, обусловленного квантовым туннелированием через межфазную поверхность, которая представляет собой структуру из двух соседних квазиодномерных квантовых ям.

Во избежание недоразумений заметим, что здесь рассматривается не начальный акт туннельного образования зародыша стабильной фазы, как в работах [6–9], а рост макроскопического зародыша, размер которого много больше критического.

2. МОДЕЛЬ КВАНТОВОЙ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ

Рассматривается простейший вариант модели, в которой переход частиц из одной фазы в другую происходит без барьера.

Пусть в капилляре при нулевой температуре и фиксированном внешнем давлении находится столб твердого гелия плотностью n , граничащий справа с жидким столбом сверхтекучего гелия длиной l и плотностью n_l (более реалистическая трехмерная картина роста кристалла не меняет качественных результатов). Полное число частиц в капилляре равно

$$n_l l + n_c c = N. \quad (3)$$

Представим классический лагранжиан, описывающий движение этой системы. Потенциальная энергия на одну частицу при нулевой температуре (химический потенциал) равна

$$\mu = \varepsilon(n) + \frac{P}{n} \quad (4)$$

($\varepsilon(n)$ — внутренняя энергия). Обе фазы считаются несжимаемыми. Равновесное давление определяется соотношением

$$\varepsilon_l(n_l) + \frac{P_0}{n_l} = \varepsilon(n) + \frac{P_0}{n_c}, \quad (5)$$

из которого следует, что

$$P_0 = n_l n_c \frac{\varepsilon(n) - \varepsilon_l(n)}{n_c - n_l}. \quad (6)$$

При равновесном давлении P_0 система находится в безразличном равновесии. Пусть давление равно равновесному с некоторым пересыщением δP :

$$P = P_0 + \delta P.$$

Роль потенциальной энергии при заданном давлении играет потенциал Гиббса:

$$U = \Phi = \mu_l n_l l + \mu_c n_c c = \left(\varepsilon_l(n_l) + \frac{P_0}{n_l} + \frac{\delta P}{n_l} \right) n_l l + \left(\varepsilon(n) + \frac{P_0}{n_c} + \frac{\delta P}{n_c} \right) n_c c. \quad (7)$$

Существенное значение имеет зависимость потенциальной энергии от пересыщения δP ,

$$U = \Phi_0 + (l + c)\delta P.$$

Член

$$\Phi_0 = \frac{n_c \varepsilon(n) - n_l \varepsilon_l(n_l)}{n_c - n_l} N$$

является константой для несжимаемых жидкостей и может быть отброшен. Кинетическая энергия связана только с жидкой фазой:

$$T = \frac{m}{2} n_l l (l + c)^2. \quad (8)$$

Таким образом, функция Лагранжа системы равна

$$L = T - U = \frac{m}{2} n_l l (l + c)^2 - \delta P (l + c). \quad (9)$$

Используя формулу (3), общий размер системы ($l + c$) свяжем с длиной жидкого столба l :

$$l + c = l + \frac{1}{n_c} (N - n_l l) = \frac{1}{n_c} N + \gamma l, \quad \gamma = \frac{n_c - n_l}{n_c}.$$

Это позволяет выразить функцию Лагранжа (вклад грани в лагранжиан системы макроскопически мал) через переменные l и \dot{l} :

$$L = \frac{m}{2} \gamma^2 n_l l \dot{l}^2 - \delta P \gamma l. \quad (10)$$

Уравнение Лагранжа

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{l}} - \frac{\partial L}{\partial l} = m \gamma^2 n_l \frac{d}{dt} (l \dot{l}) - \frac{m}{2} \gamma^2 n_l \dot{l}^2 + \gamma \delta P = 0 \quad (11)$$

представляет собой уравнение роста жидкой фазы

$$l^2 + 2l\ddot{l} = -u^2 \text{sign } \delta P, \quad u^2 = \frac{2|\delta P|}{m \gamma n_l}. \quad (12)$$

При положительном пересыщении ($\delta P > 0$) кристалл растет и $V = \dot{l} < 0$:

$$V^2 + 2l \frac{dV}{dl} \frac{dl}{dt} = -u^2, \quad u^2 + V^2 + l \frac{dV^2}{dl} = 0. \quad (13)$$

Первый интеграл уравнения (13) есть

$$(u^2 + V^2)l = A = \text{const} > 0. \quad (14)$$

В рамках классической теории роста кристалла [3] скорость роста кристалла определяется уравнением термодинамики необратимых процессов ($V \sim \mu_{sol} - \mu_{liq} \sim |\delta P|$) и однозначно задается степенью неравновесности

$$V^2 \sim (\delta P)^2. \quad (15)$$

При когерентной кристаллизации диссипация на межфазной поверхности отсутствует и скорость роста V задается двумя внешними параметрами (u^2, A), так что величина скорости роста в начальный момент времени, $|V_0|$, вообще говоря, может иметь любое значение. В дальнейшем из физических соображений примем, что в начальный момент $V_0 = 0$.

В ходе роста кристалла размер жидкой фазы монотонно уменьшается и величина ($-l$) играет роль времени. Эволюция системы описывается уравнением

$$V^2 = \frac{A}{l} - u^2. \quad (16)$$

Если в начальный момент времени $l = l_0$, то $A = u^2 l_0$ и уравнение (16) можно записать в форме

$$V^2 = \left(\frac{l_0}{l} - 1 \right) u^2.$$

Мы видим, что при уменьшении размера жидкой фазы квадрат скорости роста кристалла растет по гиперболическому закону. При этом, в отличие от формулы (15), имеем

$$V^2 \sim \delta P \quad (17)$$

и, следовательно, при малых пересыщениях скорость когерентного процесса много выше, чем скорость классической кристаллизации.

Уравнение (13) легко решается в квадратурах и дает явную зависимость $l(t)$. Однако решение имеет громоздкий вид, и мы его выписывать не будем.

3. КОГЕРЕНТНОЕ ТАЯНИЕ

Теперь рассмотрим когерентное таяние кристалла.

При отрицательном пересыщении ($\delta P < 0$) первый интеграл уравнения (13) есть

$$l|u^2 - V^2| = \text{const.}$$

Случаю $\text{const} = 0$ отвечает «стационарное» решение с постоянной скоростью таяния,

$$V = u, \quad l = ut.$$

Для оценки u^2 положим $\gamma = 1/4$, $n_l = n_c = n = a^{-3}$, где n — объемная плотность жидкого гелия, a — межатомное расстояние, $\lambda = 4\pi\hbar^2 a/m$:

$$\begin{aligned} u^2 &= \frac{2|\delta P|}{m\gamma n_l} \sim \frac{2\lambda n^2}{m\gamma n_l} \frac{|\delta P|}{\lambda n^2} \sim \frac{8\hbar^2}{\pi m^2 a^2} \frac{|\delta P|}{\lambda n^2} = \\ &= 140^2 \frac{|\delta P|}{\lambda n^2}. \end{aligned}$$

Для гелия $\lambda n^2 \approx 34$ атм. Если пересыщение составляет $34 \cdot 10^{-3}$ атм, то $u = \sqrt{140^2 \cdot 10^{-3}} = 4.4$.

4. РОСТ КРИСТАЛЛА КАК КВАНТОВОЕ ТУННЕЛИРОВАНИЕ ЧЕРЕЗ МЕЖФАЗНУЮ ПОВЕРХНОСТЬ

Вернемся к вопросу об условиях когерентного роста. В рамках квазиодномерной модели можно сформулировать более или менее разумный сценарий туннельного движения вещества из одной фазы в другую через переходную область, обладающую свойствами джозефсоновского контакта, т. е. контакта, пропускающего или не пропускающего когерентный поток в зависимости от соответствующих параметров. Такой контакт может играть роль затвора и являться ключевым звеном в общей цепочке процесса квантовой кристаллизации. Опираясь на образ атомно-шероховатой грани, представим себе, что в каждый момент времени процесс кристаллизации происходит в некоторой структуре из двух соседних квазиодномерных квантовых ям, которые могут обмениваться атомами. Пусть это будут внешний атомный слой кристалла и примыкающий к нему атомный слой либо со стороны кристалла, либо со стороны жидкости. Слева процесс кристаллизации уже закончился, а справа (в жидкости) — еще не начался. В дальнейшем процесс кристаллизации будет происходить в слоях, сдвинутых направо, и т. д. Можно представить себе, что на протяжении по крайней мере нескольких межатомных расстояний от грани в глубь жидкости сохраняются структурные корреляции кристаллического типа и плотность жидкости промодулирована наподобие параллельных атомных слоев. Подобным образом ослаблены корреляции в приповерхностной зоне кристалла. Такая картина характерна для любой границы жидкость–кристалл, однако только для границы сверхтекучая жидкость–квантовый кристалл возможна когерентная связь между соседними атомными слоями.

Рассмотрим простейшую модель переходного слоя: слева — столб жидкости плотностью n_l ,

справа — кристалл плотностью n_c . Между ними — квазиодномерная двойная δ -яма,

$$V(x) = -\frac{\hbar^2 \kappa}{m} \left[\delta \left(x + \frac{a}{2} \right) + \delta \left(x - \frac{a}{2} \right) \right],$$

промежуточной плотности. Пусть все межатомные расстояния a одинаковы. Для простоты предположим, что движение в поперечной плоскости площадью S квантовано и система находится в основном состоянии поперечного движения. Продольные состояния удовлетворяют уравнению Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) - \frac{\hbar^2 \kappa}{m} \left[\delta \left(x + \frac{a}{2} \right) + \delta \left(x - \frac{a}{2} \right) \right] \psi(x) = E\psi(x) = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \psi(x).$$

Симметричное и антисимметричное решения

$$\psi_{\pm}(x) \sim \exp \left\{ -k \left| x + \frac{a}{2} \right| \right\} \pm \exp \left\{ -k \left| x - \frac{a}{2} \right| \right\}$$

имеют энергии

$$E_{\pm} = -\frac{\hbar^2}{2ma^2} (k_{\pm} a)^2 = -\varepsilon (k_{\pm} a)^2,$$

определяемые волновыми векторами, удовлетворяющими соответственно уравнениям

$$k_{\pm} a = \kappa a (1 \pm e^{-k_{\pm} a}).$$

Чтобы антисимметричное состояние было связанным, надо взять $\kappa a > 1$. Пусть, для примера, $\kappa a = 1.5$.

Нормированные решения имеют вид

$$\psi_{\pm}^2 = \frac{1}{N_0 a^3} \frac{ak_{\pm}}{2 \pm 2(1 + k_{\pm} a)e^{-k_{\pm} a}} \times \left(\exp \left\{ -k_{\pm} \left| x + \frac{a}{2} \right| \right\} \pm \exp \left\{ -k_{\pm} \left| x - \frac{a}{2} \right| \right\} \right)^2.$$

В состоянии равновесия, когда пересыщение равно нулю, число частиц в двойной яме постоянно:

$$N = \gamma N_0 = \gamma 2S a n_c, \quad \dot{N} = 0.$$

При конечном пересыщении столб жидкости сокращается с некоторой скоростью u и

$$\dot{N} = S n_l u.$$

Рассматривая динамику системы частиц в двойной яме, будем считать, что применимо адиабатическое приближение и динамика определяется мгновенным значением параметра N .

Система описывается двумя когерентными полями $\alpha_{\pm}(t)$:

$$\psi = \alpha_+(t)\psi_+(x) + \alpha_-(t)\psi_-(x).$$

Ее лагранжиан имеет вид

$$L = \bar{\alpha}_+ \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - E_+ \right) \alpha_+ + \bar{\alpha}_- \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - E_- \right) \alpha_- - V,$$

где V — стандартное взаимодействие:

$$V = \frac{\lambda}{2} \int |\psi|^4 dV = \frac{\lambda}{2} [A|\alpha_+|^4 + B|\alpha_-|^4 + (\bar{\alpha}_+^2 \alpha_-^2 + \bar{\alpha}_-^2 \alpha_+^2 + 4|\alpha_+|^2 |\alpha_-|^2)].$$

Параметры взаимодействия (численно для $\kappa a = 1.5$)

$$A = Sa \int_{-\infty}^{\infty} \psi_+^4 dx = 0.450, \quad B = Sa \int_{-\infty}^{\infty} \psi_-^4 dx = 0.539,$$

$$C = Sa \int_{-\infty}^{\infty} \psi_+^2 \psi_-^2 dx = 0.436,$$

$$\Delta E = E_+ - E_- = -1.164 \frac{\hbar^2}{ma^2} = -1.164\varepsilon$$

написаны в безразмерной форме. Объем атомного слоя Sa включен в определение λ :

$$\lambda = \frac{4\pi\hbar^2 a_0}{mSa} = 8\pi \frac{\hbar^2}{ma^2} \frac{a_0 a}{2S} = \frac{8\pi\varepsilon\zeta}{N_0}.$$

Здесь $\varepsilon = \hbar^2/ma^2$ — характерная энергия, $N_0 = 2S/a^2$ — максимальное (кристаллическое) значение числа частиц N в двух атомных слоях, a_0 — длина рассеяния. Отношение длины рассеяния к межатомному расстоянию, $\zeta = a_0/a$, считаем свободным параметром.

Запишем лагранжиан в представлении модуль-фаза ($\alpha = \rho e^{-i\varphi}$):

$$L = \left(\dot{\Phi} - E_+ - E_- \right) \frac{N}{2} + (\dot{\varphi} + \Delta) \frac{n}{2} - \frac{\lambda}{2} \left[A \left(\frac{N+n}{2} \right)^2 + B \left(\frac{N-n}{2} \right)^2 + \frac{N^2 - n^2}{2} (\cos 2\varphi + 2) \right].$$

Здесь

$$\rho_+^2 + \rho_-^2 = N, \quad \rho_+^2 - \rho_-^2 = n, \quad \varphi_+ + \varphi_- = \Phi, \\ \varphi_+ - \varphi_- = \varphi, \quad \Delta = E_- - E_+.$$

Считая $N = \text{const}$ и обозначая $n = pN$, получаем эффективный лагранжиан

$$L = \frac{pN}{2} (\dot{\varphi} + \Delta) - \frac{\lambda N^2}{2} \times \left[A \left(\frac{1+p}{2} \right)^2 + B \left(\frac{1-p}{2} \right)^2 + 2C \frac{1-p^2}{4} (\cos 2\varphi + 2) \right].$$

Уравнения Лагранжа

$$\dot{p} = \lambda N (1 - p^2) \sin 2\varphi,$$

$$\dot{\varphi} = -\Delta + \lambda C N \left[A \frac{1+p}{2C} - B \frac{1-p}{2C} - p(\cos 2\varphi + 2) \right]$$

определяют фазовую траекторию (первый интеграл уравнений Лагранжа)

$$\frac{A}{C} \left(1 + \frac{1}{2}p \right) p - \frac{B}{C} \left(1 - \frac{1}{2}p \right) p + (1-p^2)(\cos 2\varphi + 2) - \frac{2p\Delta}{\lambda N C} = Q + 2.$$

Постоянная интегрирования Q выбрана таким образом, чтобы для траекторий, пересекающих ось абсцисс в фазовом пространстве (φ, p) , она равнялась $\cos 2\varphi_0$, где φ_0 — значение фазы при $p = 0$.

Функция Гамильтона

$$H = (E_+ + E_-) \frac{N}{2} + \frac{\lambda N^2}{8} [A + B + 2(Q + 2)].$$

Стационарная точка ($\dot{n} = 0, \dot{\varphi} = 0$) фазовой траектории есть

$$\varphi = 0, \quad p = -0.111\gamma^{-1}.$$

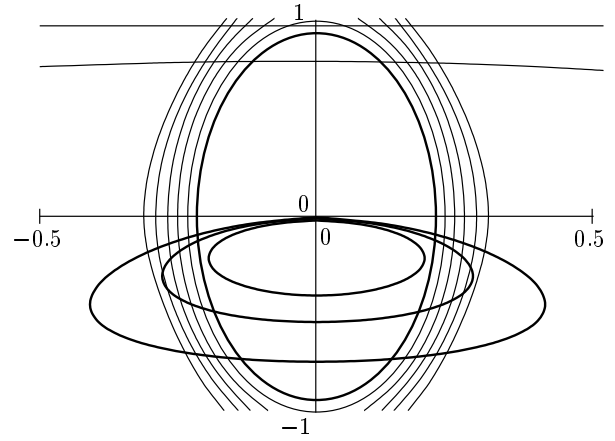
Фазовая траектория устойчива, если она проходит внутри критической линии, определяемой уравнением (устойчивость по Ляпунову)

$$\omega^2 = \frac{\partial^2 L}{\partial \varphi^2} \frac{\partial^2 L}{\partial p^2} - \left(\frac{\partial^2 L}{\partial \varphi \partial p} \right)^2 = 0.$$

Эти частоты определяют временную зависимость квантовых флуктуаций

$$\delta\varphi, \delta p \sim \exp \left(-i \int_0^t d\tau \omega(\tau) \right).$$

Адиабатическое приближение применимо, если $\dot{N} \ll N\omega/2\pi$. Отсюда скорость сокращения столба жидкости должна быть мала по сравнению с характерной скоростью $\hbar/ma \approx 40$ м/с.



Фазовые траектории и критическая линия для $ka = 1.5$. На оси абсцисс отложены φ , на оси ординат p

На рисунке приведены фазовые траектории и критическая линия для $ka = 1.5$. На оси абсцисс отложены значения φ , на оси ординат p .

Толстая вертикальная линия есть критическая линия, на которой квадрат частоты флуктуаций $\omega^2 = 0$. Тонкие вертикальные линии соответствуют неустойчивым флуктуациям с $\omega^2 < 0$. По мере удаления от центра $-\omega^2 = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5$. Состоянию с наименьшей энергией ($Q = -1.8$) соответствует тонкая траектория, касающаяся вершины критической линии. Более низких энергий не существует, так как им отвечают запрещенные значения $|p| > 1$. Приведена для наглядности траектория с $Q = -1$ (тонкая линия ниже). Состоянию с наибольшей энергией ($Q = 1.09$) соответствует толстая замкнутая траектория, почти стянутая в точку вокруг стационарной точки. Эти три траектории рассчитаны с $\gamma = 1$. Еще одна группа фазовых траекторий подобрана для демонстрации нашего качественного сценария когерентной кристаллизации. Это замкнутые горизонтальные линии, отвечающие автолокализованному движению (self-trapping) физического маятника. Для этих траекторий $Q = 1.02$, и по мере стягивания к центру параметр $\gamma = N/N_0$ принимает значения $\gamma = 0.5, 0.7, 1$. Из них лишь самая малая с $\gamma = 1$ устойчива по отношению к квантовым флуктуациям. Параметр взаимодействия $\zeta = a_0/a = 1/3$.

Предлагается следующий сюжет: система первоначально находится на неустойчивой траектории, пересекающей критическую линию. В результате передавливания появляется конечное $\dot{N} > 0$, двойной кристаллический слой зарастает, система переходит в состояние с большим значением γ . Сначала этот

процесс идет диссипативным образом, пока не попадет на устойчивую траекторию. Далее грань растет в устойчивом когерентном режиме бездиссипативно, пока γ не достигнет единицы. В этот момент в игру вступает следующий двойной слой. Можно предположить, что он уже находится на устойчивой траектории (устойчивый self-trapping), так как деление слоев на пары достаточно условно и каждый атомный слой в переходной области принадлежит одновременно и правой, и левой паре.

Таким образом, предложен новый механизм когерентного фазового перехода в гелии, который имеет существенно большую скорость, чем для диссипативного механизма. Возможно, что этот механизм реализуется в низкотемпературных экспериментах [4, 5]. Картина аномального роста кристалла, наблюдаемая в опытах Цымбаленко [5], имеет сложный характер и обладает медленной начальной стадией, в которой, согласно нашей теории, грань не может совершать устойчивое когерентное движение.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ.

ЛИТЕРАТУРА

1. А. Ф. Андреев, А. Я. Паршин, ЖЭТФ **75**, 1511 (1978).
2. К. О. Кешишев, А. Я. Паршин, А. В. Бабкин, Письма в ЖЭТФ **30**, 63 (1979).
3. А. Ф. Андреев, В. Г. Книжник, ЖЭТФ **83**, 416 (1982).
4. J. P. Ruutu, P. J. Hakonen, A. V. Babkin, A. Ya. Parshin, and G. Tvalashvili, J. Low Temp. Phys. **112**, 117 (1998).
5. V. L. Tsymbalenko, J. Low Temp. Phys. **121**, 53 (2000); В. Л. Цымбаленко, ЖЭТФ **119**, 1182 (2001).
6. И. М. Лифшиц, Ю. Каган, ЖЭТФ **62**, 385 (1972).
7. С. В. Иорданский, А. М. Финкельштейн, ЖЭТФ **62**, 403 (1972).
8. Ю. Каган, Л. А. Максимов, ЖЭТФ **76**, 687 (1979).
9. Л. А. Максимов, ЖЭТФ **108**, 1469 (1995).