

Модуль спиральности, квантовые флуктуации и переход в сверхпроводящее состояние массива джозефсоновских контактов

© С.А. Верзаков, Ю.Е. Лозовик

Институт спектроскопии Российской академии наук,
142092 Троицк, Московская обл., Россия

(Поступила в Редакцию 30 октября 1996 г.)

Исследуется влияние квантовых флуктуаций на фазовый переход в двумерном массиве джозефсоновских контактов в рамках $2D$ XU -модели. В самосогласованном гармоническом приближении линейный отклик системы на ее возмущение однородным градиентом фазы (модуль спиральности γ) вычисляется как функция безразмерной температуры Θ и квантового параметра q , обусловленного конечной емкостью каждого контакта. Расчет этой величины позволил найти зависимость температуры перехода Костерлица–Таулесса от q , которая в широкой области q хорошо согласуется с результатами численного моделирования квантовым методом Монте–Карло.

Одной из наиболее важных моделей в статистической физике систем с непрерывной симметрией является XU -модель. Она описывает флуктуационные явления и критическое поведение сверхпроводников (вне узкой области вблизи критической температуры, где существенны флуктуации сверхпроводящей щели), массивов джозефсоновских контактов [1–4], легкоплоскостных антиферромагнетиков, сверхтекучего гелия [5]. В последнее время исследователей привлекает также квантовая модификация XU -модели, описывающая массивы малых джозефсоновских контактов с учетом их емкостей, управляющих величиной квантовых флуктуаций заряда [3,4], гранулированные сверхпроводники с малыми гранулами и т. п. Таким образом, исследование системы с достаточно простым гамильтонианом XU -модели позволяет найти общие черты в поведении (в том числе и критическом) различных ее физических реализаций.

Данная работа посвящена нахождению фазовой диаграммы двумерного массива джозефсоновских контактов, описываемых квантовой двумерной XU -моделью, гамильтониан которой записывается в виде

$$\hat{H} \equiv -\frac{\hbar^2}{2C} \sum_{\mathbf{n}} \frac{\partial^2}{\partial \varphi_{\mathbf{n}}^2} + J \sum_{\mathbf{n}} \left(2 - \cos(\delta_x \varphi_{\mathbf{n}}) - \cos(\delta_y \varphi_{\mathbf{n}}) \right),$$

$$\delta_x \varphi_{\mathbf{n}} \equiv \varphi_{\mathbf{n}+\mathbf{e}_x} - \varphi_{\mathbf{n}}, \quad \delta_y \varphi_{\mathbf{n}} \equiv \varphi_{\mathbf{n}+\mathbf{e}_y} - \varphi_{\mathbf{n}}. \quad (1)$$

Здесь $\mathbf{n} = (n_x, n_y)^T$ и $n_x, n_y = 1, \dots, N$. Предполагается, что контакты расположены в узлах квадратной решетки и на систему наложены периодические граничные условия $\varphi_{\mathbf{n}} = \varphi_{\mathbf{n}} + N_{\mathbf{e}_x} = \varphi_{\mathbf{n}} + N_{\mathbf{e}_y}$.

В физической реализации, отвечающей массиву джозефсоновских контактов, первый член гамильтониана (1) описывает флуктуации кулоновской энергии одного контакта: параметр C в этом случае связан с собственной электрической емкостью контакта C_{self} следующим соотношением: $C_{\text{self}} = (2e)^2 C / \hbar^2$ (для гранулированной сверхпроводящей пленки C_{self} является емкостью одной гранулы). Мы считаем, что взаимная емкость контактов (гранул) много больше их собственной емкости и поэтому не влияет на рассматриваемые явления. Противоположный случай будет рассмотрен в другой работе.

Второй член в (1) отвечает энергии джозефсоновского взаимодействия, являющейся функцией разности фаз $\delta_{(x,y)} \varphi_{\mathbf{n}}$ в контакте. Отметим, что гамильтониан (1) адекватно описывает систему ниже (по температуре) области перехода в сверхпроводящее состояние каждой гранулы (т. е. в области, где парциальное число Гинзбурга $Gi(\Delta) \ll 1$ [3] и, следовательно, флуктуации модуля параметра порядка не существенны).

Термодинамические свойства данной системы (1) определяются двумя безразмерными параметрами: ”температурой” $\Theta = T/J$ и квантовым параметром де Бура $q = \hbar / \sqrt{JC}$ (корнем из отношения характерной энергии квантовых флуктуаций к характерной потенциальной энергии). Классическая $2D$ XU -модель ($q = 0$) испытывает фазовый переход Костерлица–Таулесса при $\Theta_c \approx 0.96$ [6]. Квантовые флуктуации понижают критическую температуру и сводят ее до нуля при критическом значении квантового параметра q_c [3,4], при котором происходит квантовый фазовый переход, аналогичный квантовому плавлению [7]. В массиве джозефсоновских контактов это проявляется в разрушении глобальной сверхпроводимости при уменьшении емкости контакта до ее критического значения. Нахождение зависимости температуры перехода от квантового параметра $\Theta_c(q)$ и является нашей задачей.

Несмотря на существенные упрощения в гамильтониане по сравнению с исходными системами, данная модель не является точно решаемой. Поэтому для ее исследования применяются различные приближения: самосогласованное гармоническое приближение [4,8], приближение среднего поля [9], вычисления при помощи фейнмановского вариационного принципа [10]. XU -модель также изучается численно при помощи квантового метода Монте–Карло интегрирования по траекториям [11–13].

В настоящей работе мы использовали самосогласованное гармоническое приближение. В этом приближении отклик на однородный градиент фазы в системе (модуль спиральности γ (helicity modulus) [14]) вычисляется как функция управляющих параметров системы q и Θ . Температура Θ_c фазового перехода Костерлица–Таулесса всей системы в сверхпроводящее состояние находилась

при помощи рассчитанной зависимости $\gamma(q, \Theta)$. Используемое самосогласованное гармоническое приближение позволяет адекватно вычислить фазовую диаграмму вплоть до довольно больших значений квантового параметра $q \sim 2.5$ (см. раздел 3). Вычисленная нами фазовая диаграмма качественно согласуется с фазовой диаграммой, полученной в численном моделировании квантовым методом Монте-Карло [13].

1. Модуль спиральности в квантовой 2D XY-модели

Рассмотрим тензор γ_{ab} линейного отклика системы на возмущение, при котором все фазы φ_n заменяются на $\varphi_n + \mathbf{k}\mathbf{n}$ (где вектор \mathbf{k} — параметр возмущения)

$$\gamma_{ab} = \frac{1}{JN^2} \left. \frac{\partial^2 F(\mathbf{k})}{\partial k_a \partial k_b} \right|_{\mathbf{k}=0}, \quad a, b = x, y,$$

где $F(\mathbf{k}) = -T \ln(\text{tr}\{\exp(-\beta \hat{H}(\mathbf{k}))\})$ — свободная энергия возмущенной системы ($\beta \equiv 1/T$), а $\hat{H}(\mathbf{k})$ — ее гамильтониан,

$$\hat{H}(\mathbf{k}) \equiv -\frac{\hbar^2}{2C} \sum_n \frac{\partial^2}{\partial \varphi_n^2} + J \sum_n (2 - \cos(\delta_x \varphi_n + k_x) - \cos(\delta_y \varphi_n + k_y)).$$

Производя дифференцирование свободной энергии и учитывая при этом тождество

$$\frac{\partial e^{\hat{A}(\alpha)}}{\partial \alpha} = \int_0^1 e^{t\hat{A}(\alpha)} \frac{\partial \hat{A}(\alpha)}{\partial \alpha} e^{(1-t)\hat{A}(\alpha)} dt,$$

выразим γ_{ab} через средние от производных от гамильтониана (взятых при $\mathbf{k} = 0$)

$$\gamma_{ab} = \frac{1}{JN^2} \left[\langle \hat{H}''_{ka kb} \rangle - \beta \left(\int_0^1 dt \langle \hat{H}'_{ka} e^{-\beta t \hat{H}} \hat{H}'_{kb} e^{\beta t \hat{H}} \rangle - \langle \hat{H}'_{ka} \rangle \langle \hat{H}'_{kb} \rangle \right) \right],$$

где $\langle \hat{O} \rangle \equiv \text{tr}\{\hat{O} \exp(-\beta \hat{H})\} / \text{tr}\{\exp(-\beta \hat{H})\}$.

Использование четности и трансляционной инвариантности невозмущенного гамильтониана позволяет упростить данное выражение до следующего вида:

$$\gamma_{ab} = \delta_{ab} \gamma,$$

$$\gamma = \langle \cos(\delta_x \varphi_0) \rangle - \Theta^{-1} \int_0^1 dt \sum_n \langle \sin(\delta_x \varphi_0) e^{-\beta t \hat{H}} \sin(\delta_x \varphi_n) e^{\beta t \hat{H}} \rangle. \quad (2)$$

Скалярная величина γ является модулем спиральности квантовой 2D XY-модели. Отметим, что γ можно было бы определить и как

$$\gamma = \left. \frac{\partial^2 F}{\partial k^2} \right|_{k=0}, \quad k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}.$$

2. Гармоническое приближение для модуля спиральности

Заменяем исходный гамильтониан (1) на эффективный гармонический гамильтониан

$$\hat{H}_h \equiv \sum_n \frac{\hat{p}_n^2}{2C} + \frac{K}{2} \sum_n |\delta \varphi_n|^2,$$

$$\hat{p}_n = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi_n}, \quad \delta \varphi_n \equiv (\delta_x \varphi_n, \delta_y \varphi_n)^T, \quad (3)$$

где K есть функция параметров исходной системы (q, θ) . Выбор этой функции обсудим далее.

В этом приближении (2) сводится к выражению

$$\gamma \approx \gamma_h = \langle \cos(\delta_x \varphi_0) \rangle_h - \Theta^{-1} \int_0^1 dt \sum_n \langle \sin(\delta_x \varphi_0) e^{-\beta t \hat{H}_h} \sin(\delta_x \varphi_n) e^{\beta t \hat{H}_h} \rangle_h. \quad (4)$$

Здесь $\langle \hat{O} \rangle_h \equiv \text{tr}\{\hat{O} \exp(-\beta \hat{H}_h)\} / \text{tr}\{\exp(-\beta \hat{H}_h)\}$. В дальнейшем в этом разделе индекс h у $\langle \dots \rangle_h$ и \hat{H}_h будем опускать.

Введем обозначение

$$I(f, g, t) \equiv \langle \exp(if) e^{-\beta t \hat{H}} \exp(ig) e^{\beta t \hat{H}} \rangle,$$

где f и g — линейные комбинации φ_n . Используя квадратичность потенциальной энергии в (3), можно показать, что

$$I(f, g, t) = \exp\left(-\frac{\langle (f)^2 \rangle + \langle (g)^2 \rangle + 2\langle f e^{-\beta t \hat{H}} g e^{\beta t \hat{H}} \rangle}{2}\right). \quad (5)$$

Основываясь на этом факте, перепишем (4) в виде

$$\gamma_h = \exp(-D/2) - \Theta^{-1} \exp(-D) \int_0^1 dt \sum_n \text{sh}(P(\mathbf{0}, \mathbf{n}, t)), \quad (6)$$

$$P(\mathbf{m}, \mathbf{n}, t) \equiv \langle (\delta_x \varphi_{\mathbf{m}}) e^{-\beta t \hat{H}} (\delta_x \varphi_{\mathbf{n}}) e^{\beta t \hat{H}} \rangle,$$

$$D \equiv \langle |\delta_x \varphi_0|^2 \rangle = P(\mathbf{0}, \mathbf{0}, t). \quad (7)$$

Таким образом, задача свелась к нахождению $P(\mathbf{m}, \mathbf{n}, t)$. Вычисление этой величины удобно произвести в представлении операторов рождения и уничтожения, через которые гамильтониан системы

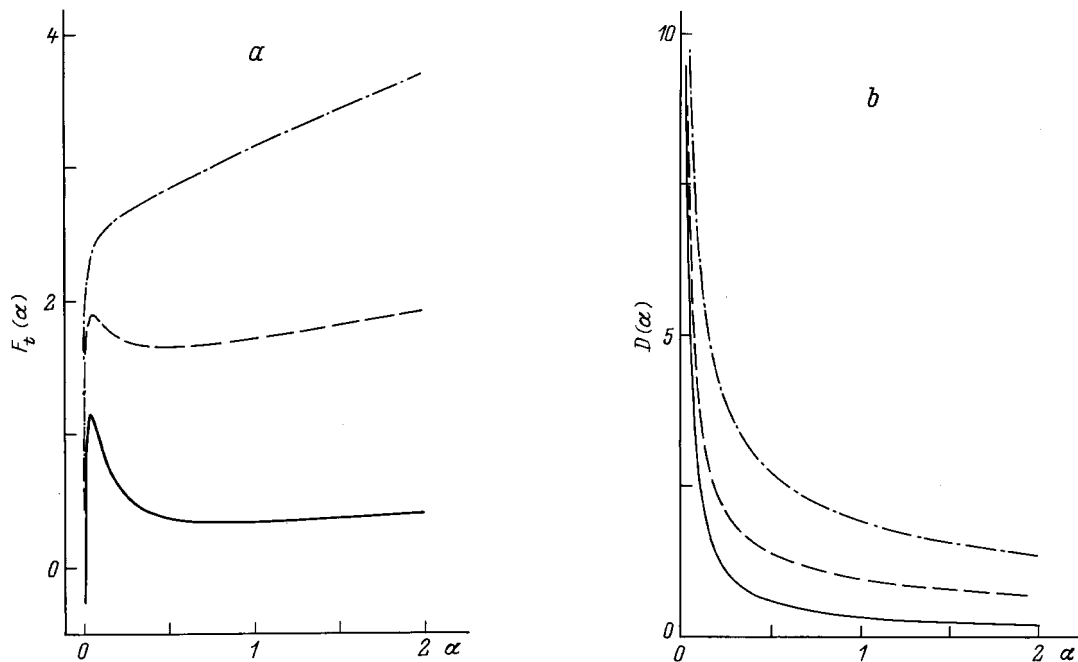


Рис. 1. Зависимости вариационной оценки свободной энергии (а) и среднеквадратичной разности фаз $\langle |\delta_x \varphi|^2 \rangle$ (б) от вариационного параметра α . $q = 0.5$ (сплошная линия), 2.0 (штриховая) и 4.0 (штрихпунктирная).

и исходные динамические переменные выражаются следующим способом:

$$\hat{H} = \frac{1}{2C} \hat{P}^2 + \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \hbar \Omega_{\mathbf{k}} \left(a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \right) = \hat{H}_0 + \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \hat{H}_{\mathbf{k}},$$

$$\hat{p}_{\mathbf{n}} = \frac{1}{N} \hat{P} - \frac{i}{N} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \sqrt{\frac{\hbar C \Omega_{\mathbf{k}}}{2}} \times \left(a_{\mathbf{k}} \exp\left(\frac{2\pi i \mathbf{n} \mathbf{k}}{N}\right) - a_{\mathbf{k}}^+ \exp\left(-\frac{2\pi i \mathbf{n} \mathbf{k}}{N}\right) \right),$$

$$\varphi_{\mathbf{n}} = \frac{1}{N} Q + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \sqrt{\frac{\hbar}{2C \Omega_{\mathbf{k}}}} \times \left(a_{\mathbf{k}} \exp\left(\frac{2\pi i \mathbf{n} \mathbf{k}}{N}\right) + a_{\mathbf{k}}^+ \exp\left(-\frac{2\pi i \mathbf{n} \mathbf{k}}{N}\right) \right),$$

где

$$\Omega_{\mathbf{k}}^2 = \frac{4K}{C} \left[\sin^2\left(\frac{\pi k_1}{N}\right) + \sin^2\left(\frac{\pi k_2}{N}\right) \right],$$

$$Q = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{n}} \varphi_{\mathbf{n}}, \quad \hat{P} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{n}} \hat{p}_{\mathbf{n}}.$$

Следовательно,

$$\delta_x \varphi_{\mathbf{n}} = \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \left(g(\mathbf{k}, \mathbf{n}) a_{\mathbf{k}} + g^*(\mathbf{k}, \mathbf{n}) a_{\mathbf{k}}^+ \right),$$

$$g(\mathbf{k}, \mathbf{n}) \equiv \frac{1}{N} \sqrt{\frac{\hbar}{2C \Omega_{\mathbf{k}}}} \exp\left(\frac{2\pi i \mathbf{n} \mathbf{k}}{N}\right) \left(1 - \exp\left(\frac{2\pi i n_1 k_1}{N}\right) \right). \quad (8)$$

Теперь, подставляя (8) в $P(\mathbf{m}, \mathbf{n}, t)$ и используя свойства операторов $a_{\mathbf{k}}$ и $a_{\mathbf{k}}^+$, находим, что модуль спиральности для квантовой $2D$ XY -модели в гармоническом приближении определяется формулой (4), в которой

$$P(\mathbf{m}, \mathbf{n}, t) = \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \frac{q \omega_{k_1}^2}{N^2 \sqrt{\alpha} \omega_{\mathbf{k}}} \frac{\text{ch}\left(q \Theta^{-1} \sqrt{\alpha} \omega_{\mathbf{k}} (1 - 2t)\right)}{\text{sh}\left(q \Theta^{-1} \sqrt{\alpha} \omega_{\mathbf{k}}\right)} \times \exp\left(\frac{2\pi i (\mathbf{m} - \mathbf{n}) \mathbf{k}}{N}\right),$$

$$D = \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \frac{q \omega_{\mathbf{k}}}{2N^2 \sqrt{\alpha}} \text{cth}\left(q \Theta^{-1} \sqrt{\alpha} \omega_{\mathbf{k}}\right), \quad (9)$$

$$\Theta \equiv T/J, \quad q \equiv \frac{\hbar}{\sqrt{JC}}, \quad \alpha \equiv K/J,$$

$$\omega_l^2 \equiv \sin^2(\pi l/N), \quad \omega_{\mathbf{k}}^2 \equiv \omega_{k_1}^2 + \omega_{k_2}^2. \quad (10)$$

3. Самосогласованное гармоническое приближение для XY -модели

Обратимся теперь к выбору K в (3) или, что то же самое, выбору параметра приближения $\alpha \equiv K/J$. Самый простой подход заключается в том, чтобы считать $|\delta \varphi_{\mathbf{n}}|^2$ аппроксимацией $(2 - \cos(\delta_x \varphi_{\mathbf{n}}) - \cos(\delta_y \varphi_{\mathbf{n}}))$ и выбрать $\alpha = 1$.

С другой стороны, можно отнести к α как к вариационному параметру (см. [4]). Свободные энергии исходного и гармонического гамильтонианов подчиняются

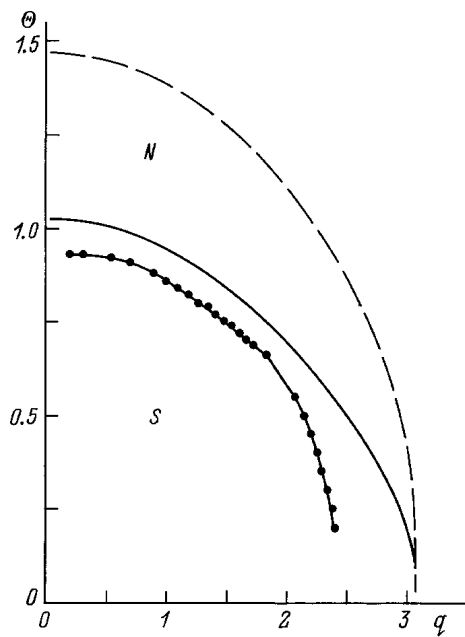


Рис. 2. Фазовая диаграмма переходов Костерлица–Таулесса. Штриховая линия ограничивает область применимости самосогласованного гармонического приближения, сплошная линия — линия фазовых переходов Костерлица–Таулесса, вычисленная в самосогласованном гармоническом приближении.

неравенству Гиббса

$$F \leq F_t \equiv F_h + \langle \hat{H} - \hat{H}_h \rangle_h. \quad (11)$$

Выбор такого значения параметра α , которое минимизирует F_t , отвечает самосогласованному гармоническому приближению.

Используя (5), (7), (10), получаем

$$\frac{F_t}{JN^2} = \frac{\Theta}{N^2} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \ln \left(2 \operatorname{sh} \left(q \Theta^{-1} \sqrt{\alpha} \omega_{\mathbf{k}} \right) \right) + 2 \left(1 - \exp(-D/2) \right) - \alpha D,$$

где значение D может быть получено из (9). Типичные графики $F_t(\alpha)$ приведены на рис. 1, *a*. Из них видно, по-первых, что $F_t(\alpha) \rightarrow -\infty$ при $\alpha \rightarrow 0$ и, во-вторых, что при некоторых q и Θ функция $F_t(\alpha)$ не имеет минимума. Причина такого поведения состоит в том, что при малых α неверно неравенство (11). Действительно, мы заменили исходный гамильтониан с периодическим потенциалом на гармонический. Собственные функции этих гамильтонианов принадлежат различным гильбертовым пространствам, и, следовательно, не вполне корректно усреднение в (11). Однако при не слишком больших $D = \langle (\delta_x \varphi_n)^2 \rangle$ нарушение периодичности не очень важно, и неравенство (11) применимо. На рис. 1, *b* приведены зависимости $D(\alpha)$, соответствующие функциям $F_t(\alpha)$, изображенным на рис. 1, *a*. Поскольку наличие локального минимума является необходимым условием

применимости (11), будем рассматривать его в качестве критерия применимости данного приближения. Примем α равным значению, доставляющему вышеуказанный локальный минимум. Это значение α является корнем

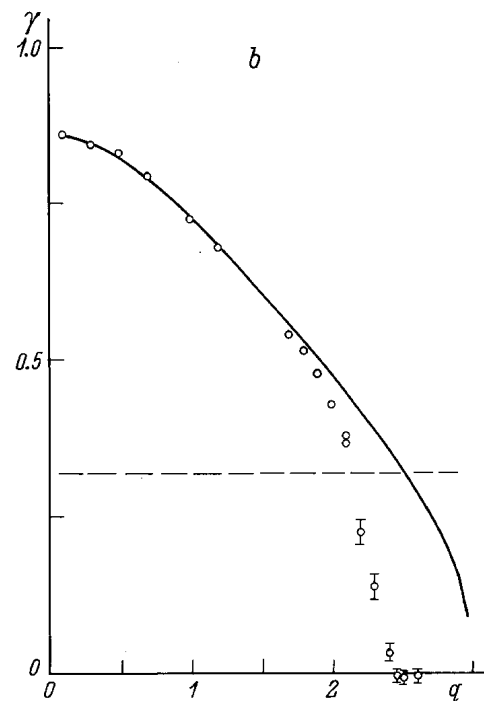
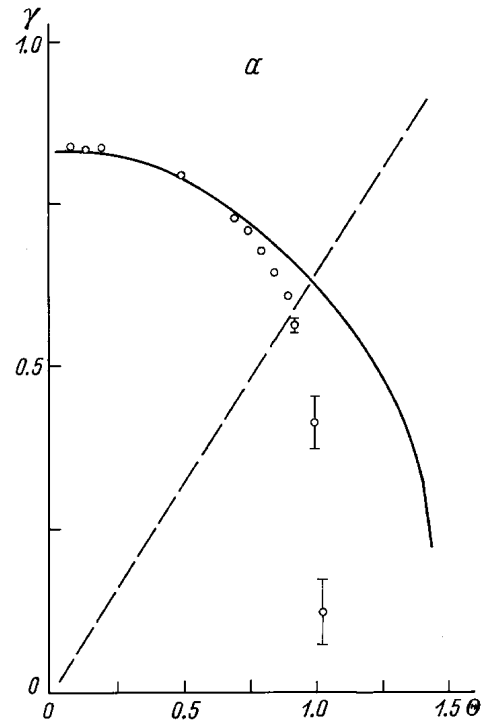


Рис. 3. Зависимости модуля спиральности от безразмерной температуры (при значении квантового параметра $q = 0.7$) (*a*) и от квантового параметра (при значении $\Theta = 0.5$) (*b*). Сплошная линия — вычисления γ в самосогласованном гармоническом приближении, кружками показан результат численного моделирования [13], штриховая линия — $\gamma = 2\Theta/\pi$.

уравнения $dF_i/d\alpha = 0$, которое после несложных преобразований можно переписать в виде

$$\alpha = \exp(-D/2). \quad (12)$$

Локальному минимуму соответствует максимальный не равный нулю корень (12). На рис. 2 штриховой линией показана область применимости самосогласованного приближения.

Используя полученные значения α , найдем в самосогласованном гармоническом приближении зависимость γ_h от q и Θ . На рис. 3, *a, b* вместе с результатами численного эксперимента [13] приведено характерное поведение модуля спиральности на срезах $q = \text{const}$, $\Theta = \text{const}$. Как видно из этих рисунков, γ , вычисленная в самосогласованном гармоническом приближении, спадает медленнее, чем полученная в численном эксперименте *ab initio*. Это означает, что использованное приближение приводит к завышению температуры фазового перехода (при данном q).

Температура фазового перехода Костерлица–Таулесса связана с модулем спиральности соотношением $\gamma = 2\pi/\Theta_c$ (см., например, обзор [1]). Решая данное уравнение с использованием полученной зависимости $\gamma_h(q, \Theta)$, находим фазовую диаграмму, приведенную на рис. 2. Зависимость $\Theta_c(q)$ правильно отражает уменьшение критической температуры фазового перехода с увеличением квантового параметра q и как следствие с ростом квантовых флуктуаций. Сравнение наших расчетов с фазовой диаграммой, полученной в численном эксперименте, показывает, что фазовая диаграмма, вычисленная в самосогласованном гармоническом приближении, является приемлемой верхней оценкой для истинной фазовой диаграммы в области значений квантового параметра $q \leq 2.5$. При дальнейшем увеличении q различие между оценками все более увеличивается до тех пор, пока теоретическая фазовая диаграмма не исчезает при $q \approx 3.07$ ($\Theta_c \approx 8.89 \cdot 10^{-2}$), пересекаясь с границей применимости приближения.

В заключение укажем, что в настоящей работе впервые в самосогласованном гармоническом приближении аналитически вычислен модуль спиральности массива джозефсоновских контактов, описываемого квантовой $2D$ XY-моделью. Показано, что данное приближение дает адекватную оценку линии фазового перехода в широкой области квантовых флуктуаций $q \leq 2.5$, согласующуюся с результатами численного эксперимента.

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ и МНТП по сверхпроводимости.

Список литературы

- [1] P. Minnhagen. *Rev. Mod. Phys.* **59**, 1001 (1987).
- [2] G. Schön, A.D. Zaikin. *Phys. Rep.* **198**, 5 & 6, 237 (1990).
- [3] S.G. Akopov, Yu.E. Lozovik. *Solid State Commun.* **35**, 693 (1980); *J. Phys.* **C15**, 4403 (1982); С.Г. Акопов, Ю.Е. Лозовик. *ДАН СССР* **258**, 6, 1351 (1981).
- [4] S.G. Akopov, Yu.E. Lozovik. *J. Phys.* **C14**, L31 (1981).
- [5] T. Matsubara, H. Matsuba. *Prog. Theor. Phys.* **16**, 14 (1956); **17**, 19 (1957).
- [6] J.M. Kosterlitz, D.J. Thouless. *J. Phys.* **C6**, 1181 (1973).
- [7] V.M. Farztdinov, Yu.E. Lozovik. *Solid State Commun.* **54**, 725 (1985).
- [8] D. Stroud, D.M. Wood. *Phys. Rev.* **B25**, 1600 (1982).
- [9] E. Simanek. *Phys. Rev.* **B23**, 5762 (1983); *Phys. Rev.* **B32**, 500 (1985).
- [10] M.Y. Choi, B.J. Kim. *Phys. Rev.* **B52**, 3624 (1995).
- [11] L. Jacobs, J.V. Jose, M.A. Movotny. *Phys. Rev. Lett.* **26**, 2177 (1984); L. Jacobs, J.V. Jose, M.A. Novotny, A.M. Goldman. *Phys. Rev.* **B38**, 4562 (1988).
- [12] Yu.E. Lozovik, L.M. Pomirchy. *Phys. Lett.* **A197**, 34, 5 (1995).
- [13] A.I. Belousov, Yu.E. Lozovik. *Solid State Commun.* In print (1996).
- [14] M.N. Barber, M.E. Fisher, D. Jasnow. *Phys. Rev.* **A8**, 1111 (1973); D. Jasnow, T. Ohta. *Phys. Rev.* **B20**, 139 (1979); C. Jayaprakash, S. Teitel. *Phys. Rev.* **B27**, 598 (1983).