## <u>ΥCΠΕΧИ ΦИЗИЧЕСКИХ НАУК</u>

#### КОНФЕРЕНЦИИ И СИМПОЗИУМЫ

# Равновесная форма поверхности кристаллов <sup>4</sup>Не вблизи критических ориентаций

### А.Ф. Андреев, Л.А. Мельниковский

Выяснены условия применимости теории среднего поля для описания термодинамики поверхности кристаллов <sup>4</sup>He. Хотя сам переход огранения относится к переходам типа Березинского-Костерлица-Таулеса, термодинамический потенциал вне узкой окрестности температуры перехода можно разлагать в ряд в духе теории Ландау фазовых переходов второго рода. Найден параметр Гинзбурга-Леванюка. Дано объяснение сингулярностей поверхностной жёсткости вблизи критических ориентаций, наблюдаемых при температурах, далёких от критической.

**Ключевые слова:** квантовые кристаллы, фазовые переходы, поверхностные явления, переход Березинского – Костерлица – Таулеса

PACS numbers: 05.70.Np, 67.80.-s, 68.35.-p, 68.35.Rh

DOI: https://doi.org/10.3367/UFNr.2017.12.038352

Юрий Васильевич Копаев внёс выдающийся вклад в теорию фазовых переходов. Модель экситонного диэлектрика Келдыша-Копаева [1] эффективно используется для описания фазовых переходов металл-диэлектрик в твёрдых телах. Ю.В. Копаевым было показано, что модель экситонного диэлектрика описывает большое многообразие новых состояний, в частности орбитальный антиферромагнетизм и тороидное упорядочение. Представляется естественным посвятить памяти Ю.В. Копаева работу по физике своеобразных фазовых переходов, связанных с изменением характера равновесной формы кристаллов. Именно, мы рассмотрим в настоящей статье фазовые переходы, в результате которых при понижении температуры возникает огранка кристаллов. Такие переходы (roughening transitions — в англоязычной литературе) описываются теорией Березинского-Костерлица-Таулеса (БКТ) [2]. Одним из авторов настоящей статьи была предложена [3] теория "среднего поля" переходов огранения, аналогичная теории Ландау переходов II рода. Высказывалось мнение [4, 5], что теория среднего поля не имеет области применимости из-за существенной роли флуктуаций.

В настоящей работе (см. также [6]) на основе анализа экспериментальных данных о свойствах поверхности

**А.Ф. Андреев.** Институт физических проблем им. П.Л. Капицы РАН, ул. Косыгина 2, 119334 Москва, Российская Федерация

E-mail: andreev@kapitza.ras.ru

Л.А. Мельниковский. Институт физических проблем

ул. Косыгина 2, 119334 Москва, Российская Федерация;

Национальный исследовательский университет

"Высшая школа экономики",

ул. Мясницкая 20, 101000 Москва, Российская Федерация E-mail: leva@kapitza.ras.ru

Статья поступила 30 марта 2018 г.

кристаллов <sup>4</sup>Не показано, что область применимости теории среднего поля, напротив, весьма широка. Эта теория неприменима лишь в весьма узкой области вблизи критической температуры. Соотношение теории БКТ и теории среднего поля аналогично соотношению теории БКТ и теории Гинзбурга – Ландау для сверхпроводящих плёнок (см., например, [7]).

В простейшей одномерной геометрии в теории среднего поля вводится поверхностный термодинамический потенциал f, связанный с поверхностной энергией  $\alpha$  единицы площади поверхности соотношением  $f = \alpha \sqrt{1 + h^2}$ , где  $h = \partial z/\partial x = \tan \theta$  — угловая переменная,  $\theta$  — угол между поверхностью и базисной плоскостью кристалла, z = z(x) — уравнение поверхности кристалла. В равновесии связь с поверхностной энергией выражается следующим образом:

$$\lambda z(x) = f(-\lambda x). \tag{1}$$

Здесь  $\tilde{f} = \tilde{f}(\eta) = f - \eta h$  — преобразование Лежандра от потенциала  $f(h), \eta = \partial f/\partial h, \lambda$  — постоянная.

Теория среднего поля основана на разложении потенциала  $\tilde{f}$  для вицинальных поверхностей  $(h \ll 1)$  по степеням параметра  $\eta$ :

$$\tilde{f} = -\frac{a}{2}\eta^2 - \frac{b}{4}\eta^4,$$
(2)

где a = a(T) — функция температуры, b — постоянная. Для выяснения условия применимости разложения (2) перейдём к безразмерным величинам

 $\tilde{f}' = b^{1/3} \tilde{f}, \quad \eta' = b^{1/3} \eta.$ 

Имеем

$$\tilde{f}' = -\frac{1}{2} \left( a b^{-1/3} \right) \eta'^2 - \frac{1}{4} \eta'^4 \,. \tag{3}$$

им. П.Л. Капицы РАН,



**Рис. 1.** Равновесная форма кристалла h(x) при  $T > T_{\rm R}$  (светлые кружки) и  $T < T_{\rm R}$  (тёмные кружки) по данным [8] (см. в [8] рис. За). Кривые проведены в соответствии с разложением (6), причём наилучшее согласие достигается при  $a\lambda|_{T>T_{\rm R}} = 3.6 \times 10^{-3}$  мм<sup>-1</sup>,  $b\lambda^3|_{T>T_{\rm R}} = 1.3 \times 10^{-3}$  мм<sup>-3</sup>,  $a\lambda|_{T<T_{\rm R}} = -8.3 \times 10^{-3}$  мм<sup>-1</sup>,  $b\lambda^3|_{T<T_{\rm R}} = 2.2 \times 10^{-3}$  мм<sup>-3</sup>.

Угловой параметр выражается как

$$h = -\frac{\partial f}{\partial \eta} = a\eta + b\eta^{3} = (ab^{-1/3})\eta' + \eta'^{3}.$$
 (4)

Если выполнено условие

$$|ab^{-1/3}| \ll 1$$
, (5)

то разложение (3) справедливо при  $\eta' \ll 1$  или, что эквивалентно, при  $h \ll 1$ .

Прямым способом нахождения коэффициентов разложения (2) является наблюдение за формой равновесной поверхности h(x). Из соотношения (1) следует

$$h(x) = -a\lambda x - b(\lambda x)^3.$$
(6)

Такие измерения для вицинальных направлений были проведены Бабкиным, Копелиовичем и Паршиным [8, рис. 3а] при температурах, близких к температуре  $T_{\rm R}$ фазового перехода огранения, как выше, так и ниже её. Оказывается, что вне весьма узкой области  $\delta T \leq 0.01$  К вблизи критической температуры форма кристаллов не зависит от температуры (при этом, конечно, при  $T > T_{\rm R}$ и  $T < T_{\rm R}$  эта форма различна). Последнее означает, что коэффициент *а* зависит от температуры только в этой области, являясь постоянным положительным,  $a = a_h$ , при  $T > T_{\rm R}$  и постоянным отрицательным,  $a = -a_l$ , при  $T < T_{\rm R}$ . Данные по некоторым двум образцам приведены на рис. 1, при этом

$$a_h b^{-1/3} = 0.03, (7)$$

$$a_l b^{-1/3} = 0.06. (8)$$

Покажем, что разложение (2) можно использовать для описания особенностей угловой зависимости поверхностной жёсткости  $\gamma$  (рис. 2), которые наблюдались в экспериментах Андреевой и Кешишева [9] вблизи особых граней (0001) и (1010) при низких по сравнению с  $T_R$ температурах и объяснение которых отсутствует.

Рассмотрим базисную грань (0001) кристалла <sup>4</sup>Не, перпендикулярную оси симметрии шестого порядка.



Рис. 2. Угловая зависимость поверхностной жёсткости. (Из работы [9].)

Сама температура огранения  $T_{\rm R} \approx 1,28$  К определяется универсальным соотношением теории фазовых переходов БКТ:

$$T_{\rm R} = \frac{2}{\pi} \gamma d^2 \,, \tag{9}$$

где  $d \approx 3$  Å — период решётки вдоль нормали к грани,  $\gamma$  — значение поверхностной жёсткости,

$$\gamma = \alpha + \frac{\partial^2 \alpha}{\partial \theta^2} = \frac{\partial^2 f}{\partial h^2} = \frac{\partial \eta}{\partial h}, \qquad (10)$$

при  $T = T_{\rm R}$  и  $h = \theta = 0$ . Критическая температура  $T_{\rm c}$  теории среднего поля определяется условием обращения в нуль коэффициента в разложении (2) перед членом второго порядка,  $a(T_{\rm c}) = 0$ , так что при температурах, достаточно близких к критической,  $|T - T_{\rm c}| \ll \delta T$ , имеем  $a = a_0 t$ , где  $t = (T - T_{\rm c})/T_{\rm c}$ .

Предполагая, что  $T_{\rm R}$  близка к  $T_{\rm c}$ , из (2) находим  $\gamma = (a_0 t)^{-1}$  и

$$t_{\rm R} = \frac{T_{\rm R} - T_{\rm c}}{T_{\rm c}} = \frac{2}{\pi} \frac{d^2}{a_0 T_{\rm c}} \,.$$

Таким образом, условием применимости излагаемой теории является  $t > t_{\rm R}$ , а параметр

$$Gi \equiv t_{\rm R} = \frac{2d^2}{\pi a_0 T_{\rm c}} \ll 1 \tag{11}$$



**Рис. 3.** Угловая зависимость поверхностной жёсткости для четырёх образцов по экспериментальным данным Андреевой и Кешишева (см. рис. 19 в [10]) и теоретическая кривая (13).

играет роль параметра Гинзбурга – Леванюка теории фазовых переходов II рода [7].

В диссертации [10] приведены подробные экспериментальные данные (см. рис. 19 в [10]) по угловой зависимости поверхностной жёсткости (10) при низких температурах  $T < T_{\rm R}$ . Разложение (4) позволяет вычислить эту зависимость:

$$\gamma = \left(\frac{\partial h}{\partial \eta}\right)^{-1} = \left(3b\eta^2 - a_l\right)^{-1}.$$
 (12)

Из (4) и (12) находим связь между  $\gamma$  и угловым параметром *h*:

$$\bar{h} = \left(\frac{\bar{\gamma}+1}{3\bar{\gamma}}\right)^{3/2} - \left(\frac{\bar{\gamma}+1}{3\bar{\gamma}}\right)^{1/2},\tag{13}$$

где  $\bar{h} = (a_l^3/b)^{-1/2}h$ ,  $\bar{\gamma} = a_l\gamma$ . При  $\bar{h} \ll 1$  имеем  $\bar{\gamma} \approx (1/2 - 3/4\bar{h}; \text{при } \bar{h} \gg 1)$  жёсткость убывает пропорционально  $h^{-2/3}: \bar{\gamma} \approx 1/3 \bar{h}^{-2/3}$ .

Для  $T < T_{\rm R}$  значение  $(a_l^3/b)^{-1/2} = 62,5$  известно из (8). Параметр

$$a_l^{-1} = 1,6 \text{ spr } \text{cm}^{-2} \tag{14}$$

определяется по наилучшему согласию с экспериментальными данными. Соответствующая зависимость (13) построена на рис. 3. Отметим, что минимальный угол, при котором экспериментальные точки хорошо ложатся на кривую (13), как раз соответствует ограничению (16) на область применимости теории среднего поля (см. ниже рис. 5).

Указанное выше отсутствие температурной зависимости поверхностной жёсткости вне непосредственной окрестности критической температуры означает, что параметр *а* зависит от температуры лишь в этой области, где он изменяется на величину порядка  $a_l$ , т.е.  $a_0 \gtrsim a_l(T_c/\delta T)$ . Используя (14), из (11) можно оценить значение Gi:

$$\operatorname{Gi} \lesssim \frac{2d^2 \delta T}{\pi a_l T_{\mathrm{c}}^2} \sim 0.1$$
.

Вицинальная поверхность кристалла в пределе нулевой температуры образована редкими ступенями высо-5 УФН, т. 188, № 11



Рис. 4. Угловая зависимость поверхностной жёсткости для вицинальных направлений при низкой температуре (по данным [10, 12]).

той *d* на симметричной грани [11]. Следствием этого является стремление поверхностной жёсткости к нулю при  $\theta \to 0$  (рис. 4). Такая картина разрушается, если на поверхности флуктуации "размывают" дискретность кристаллической решётки и само понятие ступени конечной высоты теряет смысл. В соответствии с универсальным соотношением (9) следует считать, что это происходит при

$$T \gtrsim T_{\mathbf{R}}(\theta) \equiv \frac{2d^2\gamma(\theta)}{\pi},$$
 (15)

где *d* не зависит от  $\theta$ , а поверхностную жёсткость  $\gamma(\theta)$  можно определить из (13). Таким образом, при температурах ниже температуры огранения область применимости рассматриваемой теории определяется условием

$$\bar{h} \gtrsim \left(\frac{\bar{\gamma} + 1}{3\bar{\gamma}}\right)^{3/2} - \left(\frac{\bar{\gamma} + 1}{3\bar{\gamma}}\right)^{1/2} = \\ = \left(\frac{1}{3} + \frac{2d^2}{3\pi a_l T}\right)^{3/2} - \left(\frac{1}{3} + \frac{2d^2}{3\pi a_l T}\right)^{1/2}.$$
(16)

Соответствующее множество на плоскости  $(T, \theta)$  изображено на рис. 5.



**Рис. 5.** Ограничение на область применимости теории среднего поля в соответствии с уравнением (16).

В проведённом анализе наблюдаемой формы поверхности пренебрегалось влиянием силы тяжести. Покажем, что соответствующая поправка мала. Условие равновесия в поле тяжести д имеет вид (индекс д указывает на учёт гравитации)

$$\frac{\partial \eta_g}{\partial x} = -\lambda + g z_g \,\Delta \rho \,, \tag{17}$$

где  $\Delta \rho$  — разность плотностей кристалла и жидкости. Интегрируя в основном приближении по х, получаем

$$\eta_g = \int (-\lambda + g\Delta\rho z_g) \,\mathrm{d}x \approx -\lambda \left(x + \frac{ag\Delta\rho}{6} x^3\right). \tag{18}$$

В этом же приближении легко получить сам профиль поверхности zg, интегрируя соотношение

$$\frac{\partial z_g}{\partial \eta_g} = \frac{\partial z_g}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \eta_g} = \frac{h}{-\lambda + g z_g \Delta \rho} \approx \frac{h}{-\lambda} \left( 1 + \frac{g z \Delta \rho}{\lambda} \right) =$$
$$= \frac{\partial}{\partial \eta} \left( \frac{\tilde{f}}{\lambda} + \frac{g \tilde{f}^2 \Delta \rho}{2\lambda^3} \right). \tag{19}$$

Отсюда находим

$$z_g \approx \frac{1}{\lambda} \tilde{f}(\eta_g) + \frac{g\Delta\rho}{2\lambda^3} \tilde{f}^2(\eta) \approx z - \lambda \frac{a^2 g\Delta\rho}{24} x^4 =$$
$$= -\frac{a\lambda}{2} x^2 - \frac{b\lambda^3}{4} x^4 - \lambda \frac{a^2 g\Delta\rho}{24} x^4.$$
(20)

Таким образом, пренебрегать влиянием поля тяжести можно, если

$$\epsilon \equiv \frac{a^2 g \Delta \rho}{6b \lambda^2} \ll 1.$$
<sup>(21)</sup>

В рассматриваемых условиях значение параметра  $\epsilon$ можно оценить, используя (14) и данные, приведённые в подписи к рис. 1:  $\epsilon \approx 0.07$ .

Мы благодарим К.О. Кешишева за полезное обсуждение. Работа частично поддержана программой Президиума РАН 1.4. "Актуальные проблемы физики низких температур".

#### Список литературы

- 1. Келдыш Л В, Копаев Ю В ФТТ 6 2791 (1964); Keldysh L V, Kopaev Yu V Sov. Phys. Solid State 6 2219 (1965)
- 2. Fisher D S, Weeks J D Phys. Rev. Lett. 50 1077 (1983)
- Андреев А Ф ЖЭТФ 80 2042 (1981); Andreev A F Sov. Phys. JETP 3. 53 1063 (1981)
- Иорданский С В, Коршунов С Е ЖЭТФ 87 927 (1984); Iordan-4. skii S V, Korshunov S E Sov. Phys. JETP 60 528 (1984)
- 5 Balibar S, Alles H, Parshin A Ya Rev. Mod. Phys. 77 317 (2005)
- Андреев А Ф, Мельниковский Л А ЖЭТФ 151 1080 (2017); Andreev A F, Melnikovsky L A JETP 124 920 (2017)
- König E J et al. *Phys. Rev. B* 92 214505 (2015)
   Бабкин А В, Копелиович Д Б, Паршин А Я ЖЭТФ 89 2288
   Коледиович Д Б, Паршин А Я ЖЭТФ 89 2288 (1985); Babkin A V, Kopeliovich D B, Parshin A Ya Sov. Phys. JETP 62 1322 (1985)
- 9. Андреева О А, Кешишев К О Письма в ЖЭТФ 52 799 (1990); Andreeva O A, Keshishev K O JETP Lett. 52 164 (1990)
- 10. Андреева О А, Дисс. ... канд. физ.-мат. наук (М.: Ин-т физ. проблем АН СССР, 1990)
- Ландау Л Д, Лифшиц Е М Статистическая физика Ч. 1 (М.: 11. Наука, 1995) § 155; Пер. на англ. яз.: Landau L D, Lifshitz E M Statistical Physics Vol. 1 (Oxford: Pergamon Press, 1980)
- 12. Rolley E et al. J. Low Temp. Phys. 99 851 (1995)

## Equilibrium shape of <sup>4</sup>He crystals near critical surface directions

A.F. Andreev<sup>(1)</sup>, L.A. Melnikovsky<sup>(1,2)</sup>

<sup>(1)</sup> Kapitza Institute for Physical Problems, Russian Academy of Sciences, ul. Kosygina 2, 119334 Moscow, Russian Federation

(2) National Research University "Higher School of Economics",

ul. Myasnitskaya 20, 101000 Moscow, Russian Federation

E-mail: <sup>(1)</sup>andreev@kapitza.ras.ru, <sup>(1,2)</sup>leva@kapitza.ras.ru

Conditions for applicability of mean field theory to the thermodynamics of the <sup>4</sup>He crystal surface are determined. Although the faceting transition itself is of Berezinsky-Kosterlitz-Thouless type, the thermodynamic potential outside a narrow neighborhood of the transition temperature can be expanded in the spirit of the Landau theory of second-order phase transitions. The Ginzburg-Levanyuk parameter is estimated. The singular behavior of the surface stiffness near critical directions observed for essentially noncritical temperatures is explained.

Keywords: quantum crystals, phase transitions, surface phenomena, Berezinsky-Kosterlitz-Thouless transitions

PACS numbers: 05.70.Np, 67.80.-s, 68.35.-p, 68.35.Rh

Bibliography - 12 references

Uspekhi Fizicheskikh Nauk 188 (11) 1199-1202 (2018)

DOI: https://doi.org/10.3367/UFNr.2017.12.038352

Physics-Uspekhi 61 (11) (2018)

Received 30 March 2018

DOI: https://doi.org/10.3367/UFNe.2017.12.038352