

## Квантовые флуктуации фазы в массиве мезоскопических джозефсоновских контактов

© А.И. Белоусов, Ю.Е. Лозовик

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

(Поступила в Редакцию 5 марта 1997 г.)

С помощью квантового моделирования Монте-Карло (с использованием интегралов по путям) исследуются эффекты макроскопического упорядочения в системе мезоскопических джозефсоновских контактов. Детально исследована фазовая диаграмма системы в плоскости температура–безразмерный квантовый параметр  $q$  ( $q = 2e/\sqrt{JC_0}$ , где  $J$  — джозефсоновская константа связи,  $C_0$  — собственная емкость гранул). Анализ поведения относительных среднеквадратичных смещений фаз, а также модулей спиральности и завихренности показывает необходимость использования последних двух величин как наиболее полно отражающих характер топологического фазового перехода в рассматриваемой квантовой системе. Для расчета модуля завихренности предлагаются два метода: 1) модификация вариационного принципа Гиббса–Боголюбова расчета изменения свободной энергии при изменении типа граничных условий; 2) вычисление отклика на введение бесконечно малого магнитного потока в некоторой точке системы. Расчеты подтверждают отсутствие явлений возвратного плавления и фазовых переходов не костерлица–таулессовского типа в области сильных квантовых флуктуаций фаз  $q > 1$ .

Одной из наиболее интенсивно исследуемых реализаций двумерного массива мезоскопических джозефсоновских контактов является пленка металлических гранул в матрице из диэлектрика в случае, когда удельный объем, занимаемый металлом, мал [1,2]. При низких температурах, меньших температуры сверхпроводящего перехода в объемном металле, в случае гранул большого размера ( $\geq 10^3 \text{ \AA}$ ) термодинамические свойства системы удовлетворительно описываются (см. обзор [3]) в терминах  $XY$ -модели, которая имеет топологический фазовый переход Костерлица–Таулесса при температуре  $k_b T_c \approx 0.89J$  [4]. При  $T < T_c$  джозефсоновская связь между гранулами с характерной энергией  $E_J \sim J$  приводит к квазидальному упорядочению фаз  $\varphi_i$  параметра порядка  $\psi_i = \Delta \exp i\varphi_i$  на всех гранулах, и в системе устанавливается состояние с нулевым полным сопротивлением.

Для мезоскопических гранул наряду с джозефсоновской энергией туннелирования  $E_J$  становится необходимым рассматривать также и кулоновскую энергию  $E_C \sim 2e^2/C_0$  заряда гранул собственной емкости  $C_0$ . В дальнейшем будем использовать следующие безразмерные параметры, определяющие состояние системы: безразмерную температуру  $T = k_b T/J$  и квантовый параметр  $q = 2e/\sqrt{JC_0}$ , соответствующий среднеквадратичным нулевым флуктуациям фаз параметра порядка. Температура установления глобального сверхпроводящего состояния является функцией размера (собственной емкости) гранул [1,3,5–8]. Более того, в случае чрезвычайно малых гранул сверхпроводящее состояние системы в целом может отсутствовать даже при нулевой температуре [5–7]. Поэтому представляется важным исследовать влияние размера гранул на область существования глобального сверхпроводящего состояния системы с использованием величин, наиболее полно отражающих

изменение характера упорядочения с возрастанием роли квантовых флуктуаций фазы.

В дальнейшем будем считать, что температура системы меньше температуры перехода гранулы в сверхпроводящее состояние, и флуктуациями модуля параметра порядка можно пренебречь. Тогда гамильтониан двумерной системы гранул может быть записан в виде [3,5]

$$\hat{H} = \frac{2e^2}{C_0} \sum_i (\hat{n}_i - n_0)^2 + J \sum_{\langle i,j \rangle} (1 - \cos(\hat{\varphi}_i - \hat{\varphi}_j)). \quad (1)$$

Первый член в гамильтониане соответствует кулоновской энергии заряда гранул,  $n_i - n_0$  — отклонение текущего числа  $n_i$  куперовских пар на  $i$ -й грануле от его равновесного значения  $n_0$  (когда туннелирование между гранулами отсутствует). Предполагается также, что взаимными емкостями можно пренебречь. Вторая сумма в (1) соответствует джозефсоновской энергии связи пар соседних гранул  $\langle i, j \rangle$ . Фазы параметра порядка  $\varphi_i \in [0, 2\pi)$ .

Предположим, что  $n_0 \gg 1$  и что относительные флуктуации числа куперовских пар на гранулах малы:  $\langle \hat{n}_i - n_0 \rangle / n_0 \ll 1$ . Тогда можно считать спектр оператора  $n_i \hat{n}_i$  неограниченным и принять  $n_i \hat{n}_i = -i\partial/\partial\varphi_i$ , в результате чего (1) принимает вид

$$\hat{H} = -\frac{2e^2}{C_0} \sum_i \frac{\partial^2}{\partial\varphi_i^2} + J \sum_{\langle i,j \rangle} (1 - \cos(\varphi_i - \varphi_j)). \quad (2)$$

В работе рассматривался двумерный массив  $N \times N$  гранул с гамильтонианом (2) (при  $N = 12, 20$  и периодических граничных условиях) при температурах  $0.05 < T < 1.7$  и значениях квантового параметра  $0 < q < 2.7$ .

### 1. Методика расчета и расчетные величины

Для расчета свойств системы с гамильтонианом (2) был применен квантовый метод Монте-Карло интегрирования по путям (детальное описание метода можно найти, например, в [9]). В этом методе свойства исходной двумерной квантовой системы фаз  $\{\varphi_i\}$  находятся с любой требуемой точностью по фиктивной классической трехмерной системе  $\{\varphi_i^p\}$ , образованной  $P$ -кратным размножением массива  $N^2$  гранул вдоль оси мнимого времени. Исследуемые термодинамические свойства системы находятся как средние от их классических аналогов по бoльцмановской функции распределения  $w(\varphi_1^0 \dots \varphi_{N^2}^{P-1})$

$$\begin{aligned} \langle \hat{A} \rangle &= \text{tr} \left( \hat{A} e^{-\beta \hat{H}} \right) / \text{tr} \left( e^{-\beta \hat{H}} \right) \\ &= \frac{\int_0^{2\pi} \dots \int_0^{2\pi} A(\varphi_1^0 \dots \varphi_{N^2}^{P-1}) w(\varphi_1^0 \dots \varphi_{N^2}^{P-1}) d\varphi_1^0 \dots d\varphi_{N^2}^{P-1}}{\int_0^{2\pi} \dots \int_0^{2\pi} w(\varphi_1^0 \dots \varphi_{N^2}^{P-1}) d\varphi_1^0 \dots d\varphi_{N^2}^{P-1}} \\ &+ O(P^{-2}), \\ w(\varphi_1^0 \dots \varphi_{N^2}^{P-1}) &= \exp \left\{ - \sum_{p=0}^{P-1} \left[ \sum_{i=1}^{N^2} \frac{TP \left( \varphi_i^{p+1} - \varphi_i^p - 2\pi n_i^* \right)^2}{2q^2} \right. \right. \\ &\left. \left. + \frac{1}{TP} \sum_{(i,j)} \left( 1 - \cos(\varphi_i^p - \varphi_j^p) \right) \right] \right\}, \quad (3) \end{aligned}$$

( $\varphi_i^p = \varphi_i^0$ ), где целое число  $n_i^*$  приводит к минимуму выражения  $|\varphi_i^{p+1} - \varphi_i^p - 2\pi n_i^*|$  при заданных  $\varphi_i^{p+1}$  и  $\varphi_i^p$  и соответствует простейшему учету цикличности фаз.

Точность замены исходной квантовой системы фиктивной классической и, следовательно, точность нахождения различных средних (3) характеризуются двумя параметрами [9,10]: а) параметром дискретизации  $\tau_1 = 2q^2/T^2P^2$ ; б) параметром, характеризующим неполный учет цикличности фаз  $\tau_2 = 2 \exp(-2\pi^2TP/q^2)$ . Необходимость удовлетворения требований  $\tau_{1,2} \ll 1$  накладывает условия на выбор числа слоев  $P$  при данных  $q$  и  $T$ . В проведенных расчетах параметры  $\tau_{1,2}$  изменялись в пределах  $0.001 < \tau_1 \leq 0.07$ ,  $\tau_2 \sim 0.07$ . Для вычисления многомерных интегралов (3) применялась multigrid-модификация [11] алгоритма Метрополиса. Детали алгоритма и способ выбора оптимальной процедуры расчетов подробно описаны в [10].

Для анализа состояния системы исследовалось поведение следующих величин.

1) Относительное среднеквадратичное смещение фаз. Эта величина есть аналог (абсолютного) среднеквадратичного смещения частиц, известного по критерию Линдемана, в котором полагается, что плавление системы происходит, если среднеквадратичное смещение частицы превосходит некоторую долю среднего расстояния между частицами (ее обычно полагают равной 0.15). Однако для двумерной системы эта величина расходится

логарифмически с размерами системы и поэтому не может служить критерием фазового перехода. Вместо параметра Линдемана для двумерных систем можно пользоваться относительным среднеквадратичным смещением частиц (фаз в нашем случае)

$$\delta_l = \left\langle \frac{1}{2N^2} \sum_{\langle i,j \rangle, l} |\varphi_i - \varphi_j|_{[-\pi, \pi]}^2 \right\rangle^{1/2}. \quad (4)$$

Сумма в (4) берется по всем неповторяющимся парам узлов  $\langle i, j \rangle$ , таким, что вектор, соединяющий гранулы  $i$  и  $j$ , равен  $(0, l)$  или  $(l, 0)$ . С учетом периодических граничных условий число таких пар есть  $2N^2$ . Рассматривались случаи  $l = 1, 3$ . Здесь и далее  $|f|_{[a,b]}$  означает приведение величины  $f$  к интервалу  $[a, b)$ .

2) Модуль спиральности ("helicity modulus"). Эта величина есть мера "жесткости" системы при воздействии возмущения  $\delta\phi(m, n) = \mathbf{k}\mathbf{r}(m, n) = k_x m + k_y n$  фазы гранулы с координатами  $(m, n)$ . Модуль спиральности [12–14] можно определить как

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

где  $F(\mathbf{k}) = -T \ln Z(\mathbf{k})$  — свободная энергия возмущенной системы. Тогда имеем [8] ( $\gamma_{ab} = \gamma\delta_{ab}$ ),

$$\begin{aligned} \gamma &= \frac{1}{N^2} \left\langle \sum_{m,n=1}^N \cos(\varphi^0(m+1, n) - \varphi^0(m, n)) \right\rangle \\ &- \frac{1}{N^2 P^2 T} \left\langle \left[ \sum_{p=0}^{P-1} \sum_{m,n=1}^N \sin(\varphi^p(m+1, n) - \varphi^p(m, n)) \right]^2 \right\rangle. \quad (5) \end{aligned}$$

Заметим, что в предположении равенства фаз на всех временных слоях  $p = \overline{0 \dots P-1}$  фиктивной трехмерной системы (5) переходит в выражение для модуля спиральности классической XY-модели [15]

$$\begin{aligned} \gamma_{\text{cls}} &= \frac{1}{N^2} \left\langle \sum_{m,n=1}^N \cos(\varphi^0(m+1, n) - \varphi^0(m, n)) \right\rangle \\ &- \frac{1}{N^2 T} \left\langle \left[ \sum_{m,n=1}^N \sin(\varphi^0(m+1, n) - \varphi^0(m, n)) \right]^2 \right\rangle. \quad (6) \end{aligned}$$

3) Модуль завихренности ("vorticity modulus"). Как известно, возбуждениями, ответственными за фазовый переход в системе гранул без учета емкостей (в соответствующей "классической" системе), являются топологические возбуждения — вихри [16]. При температурах  $T \sim 0.8$  в системе появляется большое количество вихрей различного топологического заряда, объединенных в пары конечного размера. Разрушение пар вихрей (образование свободного вихря) становится выгодным в точке  $T_c \approx 0.89$  фазового перехода классической системы — перехода Костерлица–Таулесса. Способность

системы образовать свободный вихрь отражает модуль завихренности ("vorticity modulus"). Он может быть определен как [17]

$$v_{\text{DAP}-P} = \frac{F_{\text{DAP}} - F_P}{\ln N}. \quad (7)$$

Здесь  $F_{\text{DAP}}$  — свободная энергия системы с диагонально-антипериодическими (DAP) граничными условиями (см. далее), вводящими дополнительный вихрь в систему,  $F_P$  — свободная энергия системы с периодическими (P) граничными условиями, когда общий топологический заряд системы равен нулю и вихревые возбуждения могут рождаться только парами, объединяющими вихри разного заряда. Очевидно, что определение (7) можно распространить и на квантовые системы (роль свободно-го вихря тогда будет играть назамкнутая вихревая нить соответствующей трехмерной системы).

Для оценки изменения свободной энергии квантовой системы при изменении граничных условий можно найти верхнюю и нижнюю вариационные оценки. В общем случае для систем  $A$  и  $B$  с гамильтонианами  $\hat{H}_A$  и  $\hat{H}_B$  соответственно справедливо неравенство (см., например, [18])

$$\begin{aligned} -\langle \hat{H}_A - \hat{H}_B \rangle_B &\leq F_B - F_A \leq \langle \hat{H}_B - \hat{H}_A \rangle_A, \\ \langle \hat{H}_B - \hat{H}_A \rangle_A &= \text{tr}((\hat{H}_B - \hat{H}_A)e^{-\beta \hat{H}_A}), \\ \langle \hat{H}_A - \hat{H}_B \rangle_B &= \text{tr}((\hat{H}_A - \hat{H}_B)e^{-\beta \hat{H}_B}), \end{aligned} \quad (8)$$

где  $F_A, (F_B)$  — свободная энергия системы  $A(B)$ . Применительно к задаче нахождения модуля завихренности квантовые системы  $N \times N$  гранул отличаются только типом граничных условий, а именно: система  $A$  подчиняется периодическим граничным условиям

$$\begin{aligned} \varphi_p^p(m, N+1) &= \varphi^p(m, 1), \quad p = \overline{0 \dots P-1}, \\ \varphi_p^p(N+1, n) &= \varphi^p(1, n), \quad p = \overline{0 \dots P-1}, \end{aligned}$$

тогда как система  $B$  — диагонально-антипериодическим граничным условиям

$$\begin{aligned} \varphi_{\text{DAP}}^p(m, N+1) &= [\pi + \varphi^p(N-m+1, 1)]_{[0, 2\pi)}, \\ & \quad p = \overline{0 \dots P-1}, \\ \varphi_{\text{DAP}}^p(N+1, n) &= [\pi + \varphi^p(1, N-n+1)]_{[0, 2\pi)}, \\ & \quad p = \overline{0 \dots P-1}. \end{aligned}$$

Заметим, что вычисления непосредственно по формуле (8) дадут лишь грубую оценку искомого изменения свободной энергии, так как системы  $A$  и  $B$  сильно отличаются друг от друга. Более точную оценку можно получить, проведя постепенное изменение гамильтониана системы  $\hat{H}_A \rightarrow \hat{H}_B$  и измерив работу этого процесса, проведенную над системой [19].

Таким образом, верхняя оценка изменения свободной энергии (7) определяется как полная работа, требуемая

на изменение типа граничных условий от периодических до диагонально-антипериодических [10],

$$\begin{aligned} F_{\text{DAP}} - F_P &\leq \sum_{t=0}^{2M} \delta A_t^{P \rightarrow \text{DAP}}, \\ \delta A_t^{P \rightarrow \text{DAP}} &= \frac{J_{t+1} - J_t}{P} \left\langle \sum_{p=0}^{P-1} \left[ \sum_{m=1}^N \{1 - \cos(\varphi_p^p(m, N+1) - \varphi^p(m, N))\} + \sum_{n=1}^N \{1 - \cos(\varphi_p^p(N+1, n) - \varphi^p(N, n))\} \right] \right\rangle, \quad t = \overline{0 \dots M-1}, \\ \delta A_t^{P \rightarrow \text{DAP}} &= \frac{J_{t+1} - J_t}{P} \left\langle \sum_{p=0}^{P-1} \left[ \sum_{m=1}^N \{1 - \cos(\varphi_{\text{DAP}}^p(m, N+1) - \varphi^p(m, N))\} + \sum_{n=1}^N \{1 - \cos(\varphi_{\text{DAP}}^p(N+1, n) - \varphi^p(N, n))\} \right] \right\rangle, \quad t = \overline{M \dots 2M}, \\ J_t &= J(\cos(\pi t / 2M))^2. \end{aligned}$$

Усреднение в этих формулах проводится по равновесной системе, у которой константы связи на границе равны  $J_t$ .

Вычисление нижней оценки требует аналогичной трансформации граничных условий от диагонально-антипериодических к периодическим

$$F_{\text{DAP}} - F_P \geq - \sum_{t=0}^{2M} \delta A_t^{\text{DAP} \rightarrow P}.$$

Модуль завихренности можно также определить несколько иначе. Предположим, что система находится в поле с векторным потенциалом  $\mathbf{A}$

$$(A_x, A_y, A_z) = \frac{\Phi_0 s}{2\pi(x^2 + y^2)}(-y, x, 0), \quad \Phi_0 = \frac{2\pi c \hbar}{e}.$$

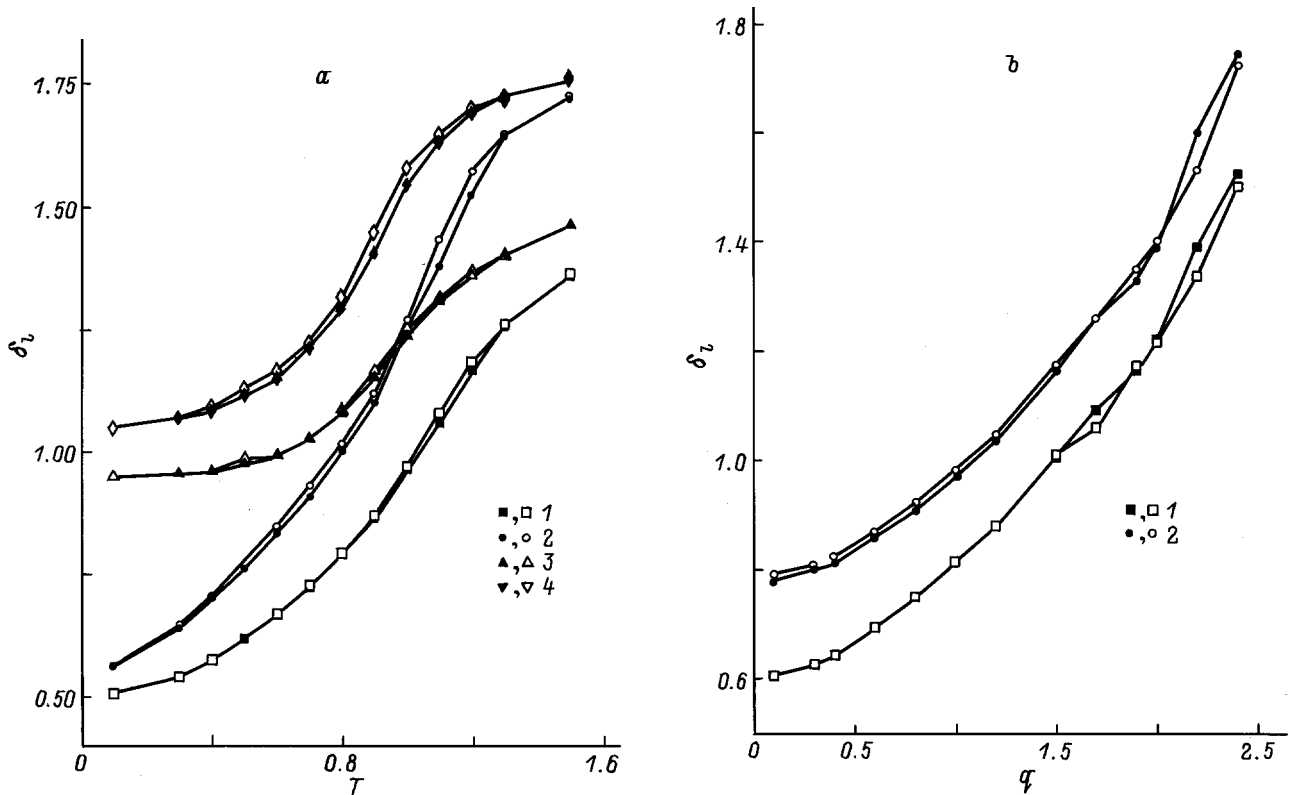
Напряженность магнитного поля  $\mathbf{H}$  при этом есть

$$(H_x, H_y, H_z) = \frac{s\Phi_0\delta(x^2 + y^2)}{\pi}(0, 0, 1).$$

Выберем начало системы координат в центре массива гранул и рассмотрим свободную энергию системы как функцию величины поля. Тогда, предполагая поле малым ( $s \ll 1$ ), имеем<sup>1</sup>

$$F(s) = F(0) + \frac{JV}{2}s^2 + O(s^3).$$

<sup>1</sup> Нетрудно видеть, что в силу симметрии гамильтониана имеет место условие  $\partial F(s)/\partial s|_{s=0} = 0$ .



**Рис. 1.** Относительные среднеквадратичные смещения  $\delta_l$ . *a* — зависимости от температуры  $T$  при различных значениях квантового параметра  $q$  и размерах системы  $N \times N$ :  $q = 0.5$  (1, 2) и 1.5 (3, 4),  $l = 1$  (1, 3) и 3 (2, 4); светлые символы — система с  $N = 20$ , темные — с  $N = 12$ ; *b* — зависимости от квантового параметра  $q$  при температуре  $T = 0.6$  для систем  $N \times N$  различного размера:  $l = 1$  (1) и 3 (2), светлые символы — система с  $N = 20$ , темные — с  $N = 12$ . Неуказанные статистические ошибки меньше размера соответствующего символа.

Для отклика системы  $V = \partial^2 F(s) / \partial s^2 |_{s=0}$  на бесконечно малое магнитное поле отсюда легко получается выражение

$$\begin{aligned}
 V = & \left\langle \sum_{m,n=1}^N \{ \Lambda_x^2(m, n) \cos(\varphi^0(m+1, n) - \varphi^0(m, n)) \right. \\
 & \left. + \Lambda_y^2(m, n) \cos(\varphi^0(m, n+1) - \varphi^0(m, n)) \} \right\rangle - \frac{1}{TP^2} \\
 & \times \left\langle \left[ \sum_{p=0}^{P-1} \sum_{m,n=1}^N \{ \Lambda_x(m, n) \sin(\varphi^p(m+1, n) - \varphi^p(m, n)) \right. \right. \\
 & \left. \left. + \Lambda_y(m, n) \sin(\varphi^p(m, n+1) - \varphi^p(m, n)) \} \right]^2 \right\rangle, \quad (9)
 \end{aligned}$$

$$\Lambda_x(m, n) = \arctan(x_{m,n} / y_{m,n}) - \arctan(x_{m+1,n} / y_{m,n}),$$

$$\Lambda_y(m, n) = \arctan(y_{m,n+1} / x_{m,n}) - \arctan(y_{m,n} / y_{m,n}),$$

где  $(x_{m,n}, y_{m,n})$  определяет положение гранулы  $(m, n)$  в выбранной системе координат.

Аналогичное выражение использовалось в работе [20] применительно к классическому гейзенберговскому ан-

тиферромагнетику на треугольной решетке. Как указывалось авторами, отклик [9] содержит как вклад, связанный с энергией кора вихря  $E_c$ , так и вклад, пропорциональный  $\log N$ :

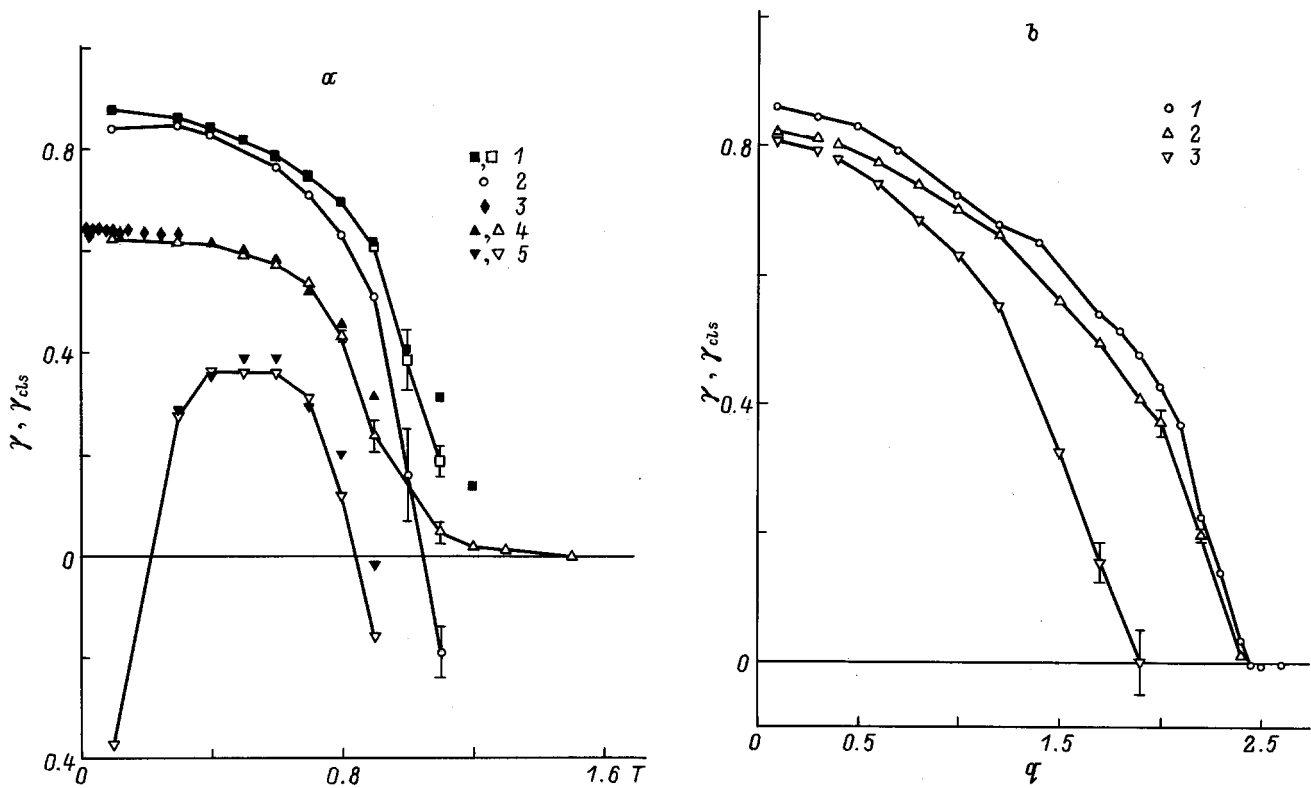
$$V(N) = E_c / J + v_H \log N.$$

Тогда, приведя расчет для систем различного размера  $N$ , можно выделить модуль завихренности  $v_H$  как [20]

$$v_H = \frac{V(N_2) - V(N_1)}{\ln(N_2 / N_1)}. \quad (10)$$

## 2. Описание и обсуждение результатов

На рис. 1 представлены характерные примеры поведения среднеквадратичного относительного смещения фаз (4) в области управляющих параметров  $\{q, T\}$ . Из рис. 1 видно, что как в "классической" ( $q < 1$ ), так и в "квантовой" ( $q > 1$ ) области среднеквадратичное смещение не испытывает резких изменений при увеличении температуры (рис. 1, *a*) и квантового параметра (рис. 1, *b*). Это не позволяет непосредственно определить линию фазовых переходов по внешнему виду найденных зависимостей.

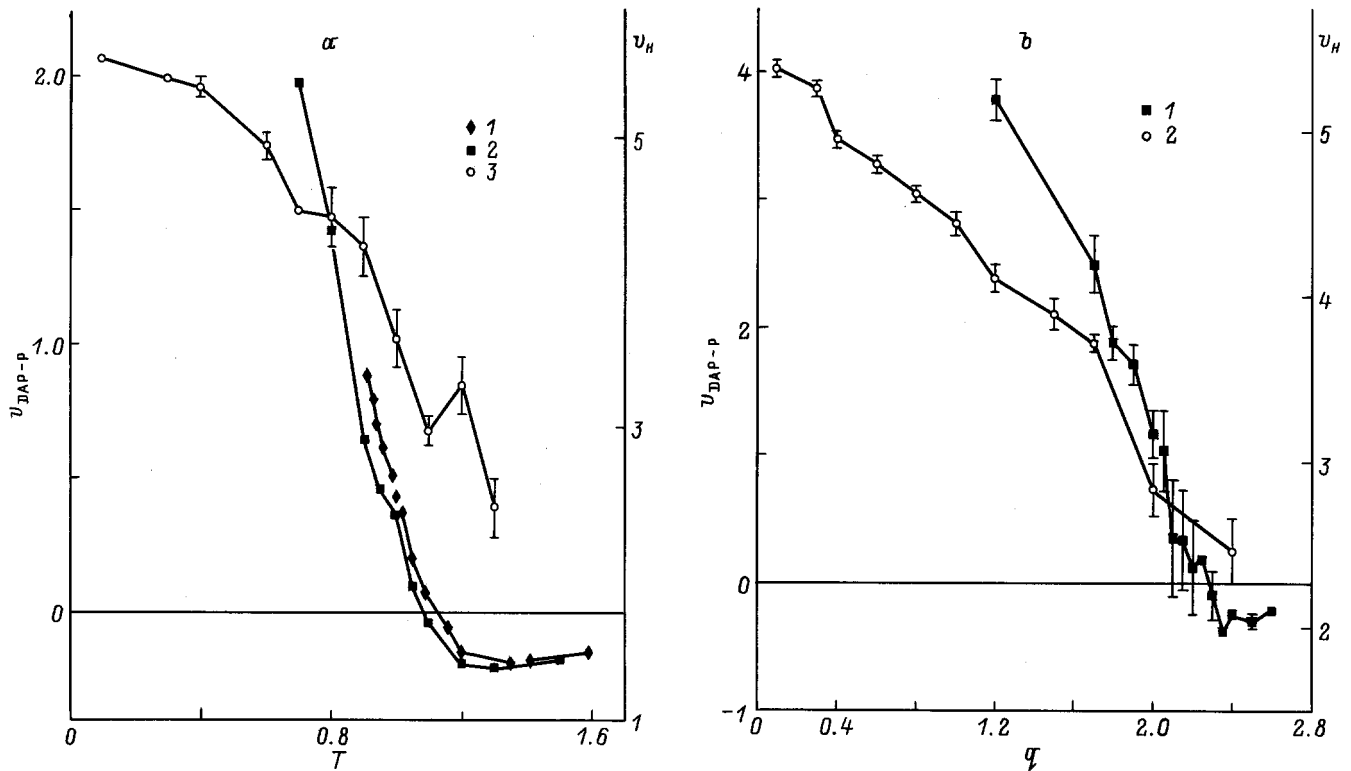


**Рис. 2.** а) Зависимости модулей спиральности  $\gamma$  (см. (5)) (1, 3, 4) и  $\gamma_{cls}$  (см. (6)) (2, 5) от температуры  $T$  при различных значениях квантового параметра  $q$  и размерах системы  $N \times N$ :  $q = 0.5$  (1, 2) и 1.5 (3–5), светлые символы — система с  $N = 20$ , темные — с  $N = 12$ . б) Зависимости  $\gamma$  (1, 2) и  $\gamma_{cls}$  (3) от квантового параметра  $q$  при температурах  $T = 0.5$  (1) и 0.6 (2, 3),  $N = 20$ .

Однако представляет интерес определение средне-квадратичных смещений  $\delta_i^*$  в точке топологического перехода  $\{q, T\} = \{0, 0.89\}$ . Расчет дает для этих величин следующие значения:  $\delta_1^* = \delta(0, 0.89) \approx 0.81$ ,  $\delta_3^* = \delta(0, 0.89) \approx 1.06$ . По аналогии с поведением подобной величины для двумерных кристаллов можно предположить, что значения  $\delta_1^*$ ,  $\delta_3^*$  могут быть универсальными в точке перехода двумерных систем с аналогичной симметрией (это позволило бы обобщить критерий плавления Линдемана на случай структурных переходов и т.п.). Подчеркнем, что для квантового перехода при  $T = 0$  величины  $\delta_1^*$ ,  $\delta_3^*$  имеют другое значение (которое, возможно, тоже универсально для аналогичных квантовых систем), что можно видеть из рис. 1.

По определению, модуль спиральности есть величина, отражающая свойства системы при воздействии бесконечно малого сдвигового возмущения. Обращение модуля спиральности в нуль свидетельствует о разупорядоченности системы. Рассмотрим поведение  $\gamma(q)$  при движении вдоль линий  $T = 0.5, 0.6$  (см. рис. 2, а). При увеличении роли квантовых флуктуаций (увеличении параметра  $q$ ) величина модуля спиральности (5), постепенно уменьшающаяся вплоть до некоторого критического значения  $q^*(T)$ , достаточно быстро падает до нуля. Общей закономерностью является уменьшение

величины скачка  $\gamma(q^*)$  при больших температурах. Аналогичное поведение модуля спиральности наблюдается и вдоль линий  $q = \text{const}$ . Действительно, при  $q = 0$  имеется резкое падение величины  $\gamma(T)$  в точке  $T \sim 0.9$ , связанное с фазовым переходом Костерлица–Таулесса в соответствующей классической системе. Подобным образом модуль спиральности изменяется вдоль всех линий  $q = \text{const}$ . Характерные зависимости для  $q = 0.5, q = 1.5$  показаны на рис. 2, б. Отметим только возрастающую пологость кривых и уменьшение величины "критического скачка" (см. выше) при больших  $q$ , что затрудняет точное определение положения точки фазового перехода по скачку  $\gamma(q, T)$ . На рис. 2 приведены также результаты расчетов по формуле (6), соответствующие нахождению модуля спиральности  $\gamma_{cls}$  классической  $2DXY$ -модели по некоторому слою квантовой  $2D + 1XY$ -модели. Как указывалось выше (см. раздел 1), величина  $\gamma_{cls}$  не учитывает раскоррелированности временных слоев  $\{\varphi_i^p\}$ ,  $p = 0 \dots P - 1$  фиктивной трехмерной системы, и, следовательно, значительное отличие ее от истинного модуля спиральности (5) свидетельствует о том, что квантовые флуктуации фаз велики (временные слои слабо скоррелированы). Таким образом, становится очевидным, что нарушение временной корреляции фаз не может привести к уменьшению модуля спиральности, как это предполагалось в работе [21]. Напротив, уменьшение



**Рис. 3.** а) Зависимости модулей завихренности  $v_{\text{DAP-P}}$  (см. (7)) (1, 2) и  $v_H$  (см. (10)) (3) от температуры  $T$  при значениях квантового параметра  $q = 0.0$  (1) и  $0.7$  (2) и  $1.5$  (3). 1, 2 —  $N = 12$ , 3 —  $N_1 = 12$ ,  $N_2 = 20$ . б) Зависимости  $v_{\text{DAP-P}}$  (1) и  $v_H$  (2) от квантового параметра  $q$  при температурах  $T = 0.5$  (1) и  $0.6$  (2) и различных размерах системы  $N \times N$ . 1 —  $N = 12$ , 2 —  $N_1 = 12$ ,  $N_2 = 20$ .

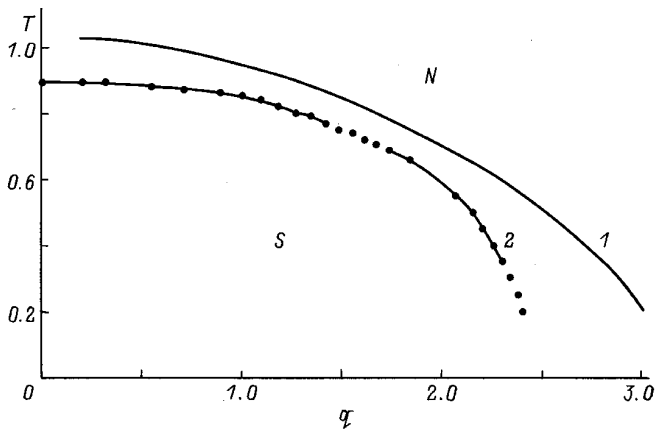
жесткости системы происходит вследствие пространственного разупорядочения фаз параметра порядка, что непосредственно видно из рис. 2.

Нарушение временной корреляции слоев соответствующей трехмерной классической системы указывалось авторами [8,21] как возможная причина возвратного плавления, отождествленного с фазовым переходом первого рода, обнаруженным при очень низких температурах ( $T \sim 0.05$  при  $q \sim 0.5$ ). Наши расчеты не подтверждают наличия возвратного плавления системы в области  $q < 1.5$ , что видно из рис. 2. Отметим также, что измеряемые величины, определенные по системе конечного размера  $N \times N$ , могут значительно отличаться от искомым термодинамических средних в области  $T < q/N$ , где система становится эффективно трехмерной [6,7,22], и в интерпретации поведения измеряемых величин при достаточно низких температурах следует проявлять осторожность.

Рассмотрим результаты расчета модуля завихренности, полученные с использованием различных определений (7), (10). Из определения величины (7) следует, что обращение модуля завихренности  $v_{\text{DAP-P}}$  в нуль свидетельствует о разупорядоченности системы и уменьшении затрат на образование свободной разомкнутой вихревой нити. На рис. 3 представлены результаты расчетов величины модуля завихренности (7) для системы

$N \times N = 12 \times 12$  при движении вдоль линий  $q = 0.0$  и  $0.7$  и  $T = 0.5$ . Величины ошибок, указанных на рисунках, определяются отличием верхней и нижней вариационных оценок. Внешний вид зависимостей  $v_{\text{DAP-P}}(T)$  и точки обращения величины  $v_{\text{DAP-P}}$  в нуль близки для классической ( $q = 0$ ) и слабо квантовой ( $q = 0.7$ ) систем. Тенденция к понижению температуры фазового перехода с увеличением квантового параметра  $q$ , выявленная из зависимостей величины модуля спиральности как функции этого параметра и температуры  $\gamma = \gamma(T)|_{q=\text{const}}$  и хорошо заметная из рис. 2, подтверждается также поведением модуля завихренности. Действительно, точка перехода через нуль графика и "появления свободных вихревых нитей в системе" сдвигается в сторону меньших температур с повышением величины квантового параметра.

Точки фазовой диаграммы  $\{q_v, T_v\}$ , в которых модуль завихренности (7) меняет знак, можно рассматривать как точки, в которых среднее расстояние между свободными вихрями (вихревыми нитями) становится равным размеру системы  $N$  [17]. В предыдущей работе [22] было показано, что области резких изменений корреляционной длины системы содержат точки обращения в нуль модуля завихренности, т.е. возбуждения типа "разомкнутая вихревая нить" определяют характер изменения корреляционной



**Рис. 4.** Фазовая диаграмма двумерной квантовой джозефсоновской системы ( $2D + 1XY$ -модель).  $S$  — область глобальной сверхпроводимости,  $N$  — область нормального состояния с неупорядоченными фазами параметра порядка.  $1$  — граница упорядоченного состояния, найденная с помощью модуля спиральности в самосогласованном гармоническом приближении [24],  $2$  — результаты расчета квантовым методом Монте-Карло.

ляционной функции фаз и являются ответственными за фазовый переход в квантовой системе.

Поведение величины  $v_H$ -модуля завихренности (см. (10)), вычисленного как отклик на введение магнитного потока в некоторой точке системы, существенно отличается от рассмотренного выше для  $v_{DAP-P}$ . Зависимости  $v_H(T)$  (рис. 3, *a*) и  $v_H(q)$  (рис. 3, *b*) сходны по внешнему виду с графиками для модуля спиральности (рис. 2). Поэтому граница упорядоченной фазы может быть определена по положению области резких изменений величины  $v_H(q, T)$ . Расчет, однако, показывает, что определение линии фазового перехода таким образом (без проведения процедуры масштабирования и нахождения ренормгрупповых параметров) требует работы с системами гораздо большего размера, чем  $20 \times 20$ . Это ставит под сомнение эффективность использования величины  $v_H$  для определения границы упорядоченной фазы. Оказалось, что время, затраченное на вариационную процедуру определения  $v_{DAP-P}$  по системе  $12 \times 12$ , значительно меньше (при той же точности расчета) времени, необходимого для определения  $v_H$  по системам с размерами  $N_1 = 12$ ,  $N_2 = 16$ .

Сравнивая поведение рассчитанных величин в области изменения параметров  $q$  и  $T$ , можно построить фазовую диаграмму системы, которая представлена на рис. 4. Для сравнения также показан результат расчета границы упорядоченной фазы при помощи метода самосогласованного гармонического приближения [23] (см. также [7]). Найдено, что модуль завихренности  $v_{DAP-P}$  является наиболее информативным при анализе свойств системы мезоскопических джозефсоновских контактов.

Авторы выражают благодарность С.А.Верзакову за полезные обсуждения.

Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований, межотраслевыми программами "Физика наноструктур" и "Поверхностные атомные структуры".

## Список литературы

- [1] B. Abeles. Phys. Rev. **B15**, 2828 (1977).
- [2] D. Imry. Phys. Rev. **B24**, 6353 (1985).
- [3] G. Schön, A.D. Zaikin. Phys. Rep. **198**, 5&6, 237 (1990).
- [4] P. Olsson. Phys. Rev. **B52**, 4511 (1995).
- [5] К.В. Ефетов. ЖЭТФ **78**, 2017 (1979).
- [6] S. Doniach. Phys. Rev. **B24**, 5063 (1981).
- [7] Yu.E. Lozovik, S.G. Akopov. J. Phys. **C14**, L31 (1981); S.G. Akopov, Yu.E. Lozovik. J. Phys. **C15**, 4403 (1982).
- [8] L. Jacobs, J.V. Jose, M.A. Novotny. Phys. Rev. Lett. **26**, 2177 (1984); L. Jacobs, J.V. Jose, M.A. Novotny, A.M. Goldman. Phys. Rev. **B38**, 4562 (1988).
- [9] D.M. Ceperley. Rev. Mod. Phys. **67**, 279 (1995).
- [10] А.И. Белоусов, Ю.Е. Лозовик. Мат. моделирование **3**, в печати (1997).
- [11] W. Janke, T. Sayer. Chem. Phys. Lett. **201**, 499 (1993).
- [12] M.E. Fisher, M.N. Bardar, D. Jasnow. Phys. Rev. **A8**, 1111 (1973).
- [13] T. Ohta, D. Jasnow. Phys. Rev. **B20**, 139 (1979).
- [14] P. Minnhagen. Rev. Mod. Phys. **59**, 1001 (1987).
- [15] S. Teitel, C. Jayaprakash. Phys. Rev. **B27**, 598 (1983).
- [16] J.M. Kosterlitz, D.J. Thouless. J. Phys. **C6**, 1181 (1973).
- [17] W. Kawamura, H. Kikuchi. Phys. Rev. **B47**, 1134 (1993).
- [18] Р. Фейнман. Статистическая механика. Мир (1978).
- [19] G.J. Hogerson, W.P. Reinhardt. J. Chem. Phys. **102**, 4151 (1995).
- [20] B.W. Southern, H.-J. Xu. Phys. Rev. **B52**, R3836 (1995).
- [21] C. Rojas, J.V. Jose. Phys. Rev. **B54**, 12361 (1996).
- [22] A.I. Belousov, Yu.E. Lozovik. Solid State Commun. **100**, 421 (1996).
- [23] С.А. Верзаков, Ю.Е. Лозовик. ФТТ, **39**, 818 (1996).