

## ДЖОЗЕФСОНОВСКИЙ МАССИВ МЕЗОСКОПИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ. МОДУЛЯЦИЯ СВОЙСТВ СИСТЕМЫ ХИМИЧЕСКИМ ПОТЕНЦИАЛОМ

*А. И. Белоусов, С. А. Верзаков, Ю. Е. Лозовик\**

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

Поступила в редакцию 8 декабря 1997 г.

Рассматривается фазовая диаграмма двумерного джозефсоновского массива мезоскопических объектов (сверхпроводящих гранул, сверхтекучего гелия в пористой среде, ловушек с бозе-конденсированными атомами и т. п.). Учет квантовых флуктуаций как модуля, так и фазы сверхпроводящего параметра порядка проводится в рамках бозонной решеточной модели Хаббарда. Модуляция среднего числа заполнения  $n_0$  узлов системы («числа куперовских пар» на гранулу, числа атомов в ловушке и т. п.) приводит к изменению состояния массива, причем характер этих изменений существенно зависит от рассматриваемой области фазовой диаграммы. В области значительных квантовых флуктуаций фаз сверхпроводящего параметра порядка изменение химического потенциала приводит к осцилляциям с чередованием сверхпроводящего (сверхтекучего) и нормального состояний массива. Напротив, в области слабого взаимодействия бозонов свойства системы монотонным образом зависят от  $n_0$ . Понижение температуры и увеличение силы взаимодействия частиц приводит к уменьшению ширины области изменения  $n_0$ , в которой свойства системы слабо зависят от среднего числа заполнения. Фазовая диаграмма массива получена отображением рассматриваемой квантовой системы на классическую двумерную ХУ-модель с перенормированной джозефсоновской константой связи и согласуется с результатами наших квантовых расчетов методом Монте-Карло интегрирования по траекториям.

### 1. ВВЕДЕНИЕ

Успехи в технике микролитографии позволили создавать регулярные массивы мезоскопических джозефсоновских объектов. К системам такого рода, активно исследующимся экспериментально и теоретически, можно отнести, например, сверхтекучий гелий в пористой среде<sup>1)</sup> (см. [2] и цитируемую там литературу), решетки мезоскопических джозефсоновских контактов [3, 4] или ультрамалых сверхпроводящих гранул [5, 6]. Интересной физической реализацией джозефсоновского массива являются джозефсоновские переходы в создаваемых с помощью литографии структурах со сверхтекучим <sup>3</sup>He [7]. Значительные успехи в экспериментах с бозе-конденсатом атомов, охлажденных лазерным излучением и последующим испарением [8–10], позволяют надеяться и на осуществление джозефсоновского массива из близких магнитооптических ловушек с бозе-конденсированными атомами<sup>2)</sup>, либо кластерами бозе-конденсированных ато-

\* E-mail: lozovik@isan.troitsk.ru

<sup>1)</sup> Двумерные джозефсоновские массивы (с мезоскопическими элементами) со сверхтекучим гелием можно, в принципе, осуществлять, создавая на подложке соответствующий «рисунок» из цезия (так как цезий не смачивается гелием [1]).

<sup>2)</sup> Интерференция двух бозе-конденсатов недавно исследовалась в [11].

мов, охлажденных и локализованных в узлах системы стоячих электромагнитных волн. Наконец, другой замечательной реализацией джозефсоновского массива могла бы быть система джозефсоновски связанных «озер» из бозе-конденсированных экситонов в одиночных либо двойных квантовых ямах и расположенных в минимумах случайного поля, обусловленного шероховатостью поверхностей ям, т. е. в «естественных» квантовых точках [12], либо в массиве искусственных квантовых точек.

Для определенности изложение далее будем проводить на примере системы сверхпроводящих мезоскопических гранул или джозефсоновских контактов, однако полученные результаты относятся и ко всем упомянутым выше системам. Рассмотрим регулярный массив мезоскопических гранул, находящийся на проводящей подложке и отделенный от нее тонким слоем диэлектрика. Напряжение, приложенное к проводящей подложке, выполняет роль химического потенциала куперовских пар, определяющего среднее число заполнения  $n_0$  гранул системы [13, 14]. В случае, например, сверхтекучего гелия в пористом материале химический потенциал атомов можно варьировать (за счет вклада вандерваальсова взаимодействия) путем изменения толщины пленки адсорбированного гелия [15, 16]. Управление же состоянием массива мезоскопических ловушек с охлажденными атомами может осуществляться изменением среднего числа атомов в системе (например, их захватом из внешнего потока).

Рассматриваемые системы, характер происходящих процессов в которых определяется бозонными степенями свободы, удобно описывать решеточной бозонной моделью Хаббарда [17, 18] с гамильтонианом

$$\hat{H} = \frac{t}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} (2a_i^\dagger a_i - a_i^\dagger a_j - a_j^\dagger a_i) + \frac{U}{2} \sum_i (a_i^\dagger a_i)^2 - \mu \sum_i a_i^\dagger a_i. \quad (1)$$

Узел  $i$  в такой модели соответствует одной сверхпроводящей грануле либо поре с гелием, одной ловушке с бозе-конденсатом и т. п. Операторы  $a_i^\dagger$  ( $a_i$ ) — бозевские операторы рождения (уничтожения) «эффективного» бозона на узле  $i = \overline{1, N^2}$  решетки  $N \times N$ . Первый член в гамильтониане учитывает кинетическую энергию частиц, соответствующую энергии джозефсоновского туннелирования и описываемую параметром  $t$ . Второй член в (1) описывает взаимодействие эффективных бозонов на грануле с характерной энергией  $U_i > 0$ .

Модель (1) интересна тем, что она позволяет исследовать свойства массивов мезоскопических структур, относительные флуктуации модуля сверхпроводящего параметра порядка в которых велики. В этой связи отметим, что использование квантовой ХУ-модели оправдано лишь в силу малости этих флуктуаций [14], т. е. в случае массивов макроскопических гранул.

При  $T = 0$  решеточная система (1), имеющая фазу моттовского изолятора и сверхпроводящую фазу, исследовалась как аналитически [17–19], так и методами компьютерного моделирования [20, 21]. В данной работе мы будем интересоваться свойствами системы (1) при конечных температурах, отвлекаясь от интересных квантовых фазовых переходов при  $T = 0$  [22]. В работах [23] исследование ограничивалось случаем целочисленного (соизмеримого) заполнения, когда среднее число бозонов на узле (грануле)  $n_0 = \langle a_i^\dagger a_i \rangle$  — целое. При  $T = 0$  добавление еще хотя бы одной частицы в сколь угодно большую систему кардинально меняет ее свойства. А именно, система при нецелом среднем числе бозонов на гранулу остается сверхпроводящей при любых величинах взаимодействия  $U/t$  между частицами [17–22]. Очевидно, что это удивительное поведение

должно быть присуще лишь предельной точке  $T = 0$ . Действительно, как показано ниже, при конечных температурах свойства системы слабо меняются в полосе  $n_0 = k \pm \delta n_0$  вблизи целочисленного заполнения, ширина  $2\delta n_0$  которой уменьшается с понижением температуры.

Целью настоящей работы является исследование изменений, которым подвергается характер упорядочения в массиве гранул при варьировании напряжения подложки (химического потенциала эффективных бозонов). При этом мы не используем упрощающего предположения о малости относительных флуктуаций модуля сверхпроводящего параметра порядка. Результаты, представленные ниже, соответствуют рассмотрению массива мезоскопических объектов, среднеквадратичные флуктуации числа частиц в которых сравнимы с их средним числом. В разд. 2 мы изложим результаты расчетов по теории среднего поля. Используемый метод соответствует отображению исходной бозонной модели (1) на эффективную классическую  $XU$ -модель с перенормированной джозефсоновской константой связи. Для уточнения результатов аналитических расчетов мы используем квантовый метод Монте-Карло интегрирования по траекториям (см. разд. 3). Обсуждение и сравнение результатов, проводимое в разд. 4, завершает изложение материала.

## 2. БОЗОННАЯ МОДЕЛЬ ХАББАРДА В ПРИБЛИЖЕНИИ СРЕДНЕГО ПОЛЯ

Качественную оценку фазовой диаграммы модели (1) можно получить, следуя подходу, изложенному в работах [19, 23, 24]. В рамках этого метода граница упорядоченного состояния определяется исчезновением локальной плотности сверхтекучей компоненты в эффективном функционале, описывающем длинноволновые возбуждения системы. Последний может быть получен обычным образом с использованием преобразования Хаббарда–Стратоновича (см., например, [25]) и последующим разложением эффективного функционала по компонентам флуктуирующего поля [19, 24]. Из условия обращения в нуль локальной плотности сверхтекучей компоненты для системы, описываемой гамильтонианом (1), находим соотношение для определения границы упорядоченного состояния:

$$\begin{aligned} \bar{q}^2 = 4 \sum_{n=0}^{\infty} \left[ \exp \left( -\frac{0.5\bar{q}^2(n-\bar{\eta})^2}{\bar{T}} \right) - \exp \left( -\frac{0.5\bar{q}^2(n+1-\bar{\eta})^2}{\bar{T}} \right) \right] \times \\ \times \frac{n+1}{2(n-\bar{\eta})+1} \left[ \sum_{n=0}^{\infty} n \exp \left( -\frac{0.5\bar{q}^2(n-\bar{\eta})^2}{\bar{T}} \right) \right]^{-1}. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь мы использовали независимые безразмерные параметры, определяющие состояние системы:

$$\bar{q} = \sqrt{\frac{U}{t}}, \quad \bar{T} = \frac{k_B T}{t}, \quad \bar{\eta} = \frac{\mu}{U} - \frac{2t}{U}.$$

Среднее число частиц на гранулах системы, находящейся в разупорядоченном состоянии, определяется уравнением

$$n_0 = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} n \exp \left\{ -0.5\tilde{q}^2(n - \tilde{\eta})^2/\tilde{T} \right\}}{\sum_{n=0}^{\infty} \exp \left\{ -0.5\tilde{q}^2(n - \tilde{\eta})^2/\tilde{T} \right\}}. \quad (3)$$

Сплошные линии на рис. 1а представляют фазовую диаграмму системы (1) в переменных  $\{\sqrt{U}/t, \mu/U\}$ , полученную решением уравнения (2) при различных температурах  $k_B T/t$ . Область малых значений параметра  $U/t$  (малой энергии взаимодействия частиц) соответствует сверхпроводящему (S) состоянию системы.

При  $k_B T/t \rightarrow 0$  неупорядоченное состояние системы соответствует целому сред-

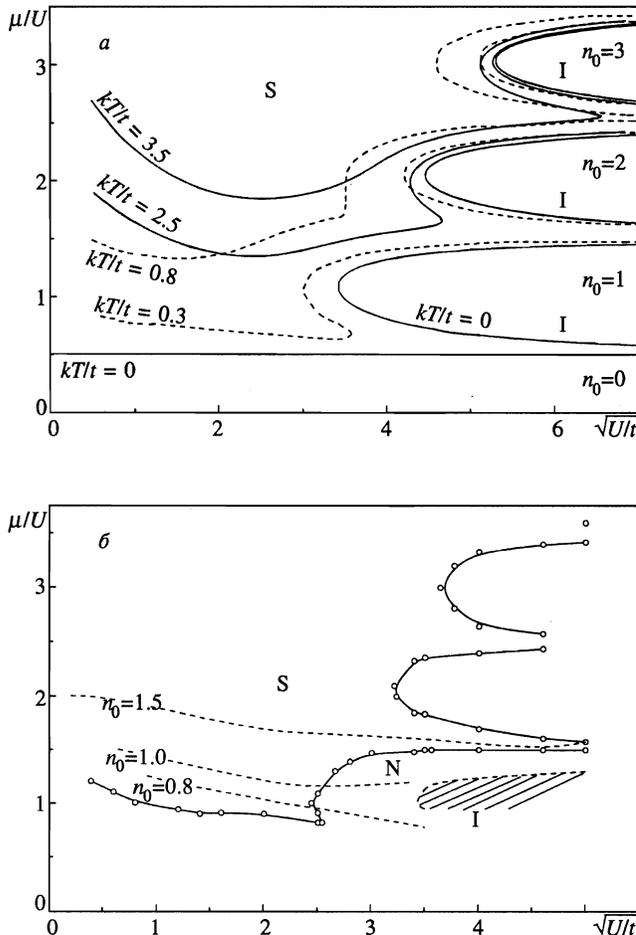
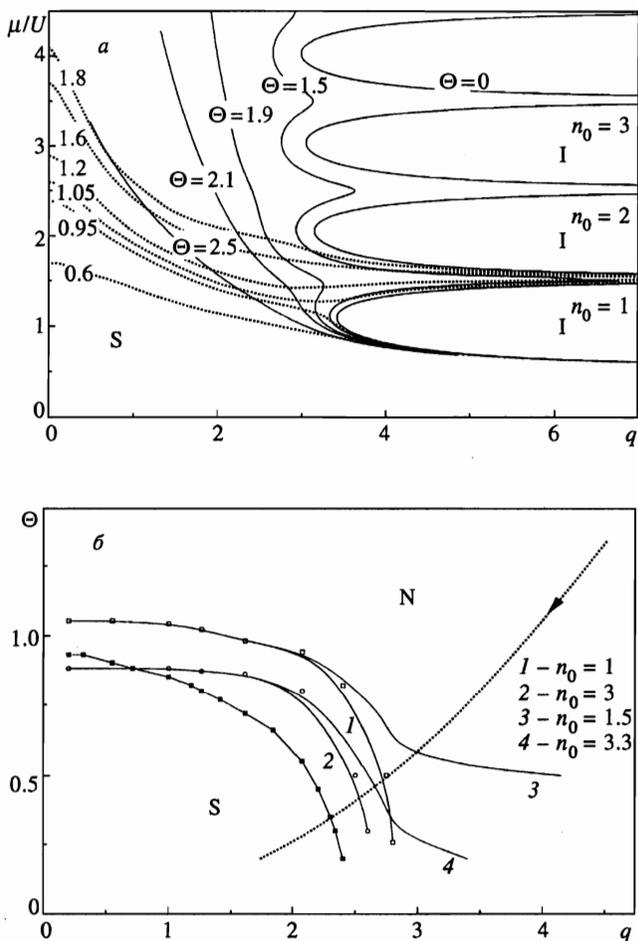


Рис. 1. Фазовая диаграмма модели Хаббарда (1) в координатах  $\{\sqrt{U}/t, \mu/U\}$ . S — сверхпроводящее состояние; N — нормальное (металлическое) состояние; I — изолятор Мотта (заштрихованная область на рис. б). а) Расчет по теории среднего поля. Сплошные линии получены решением уравнения (2) и соответствуют исчезновению локальной плотности сверхтекучей компоненты. На штриховых линиях происходит топологический переход Костерлица–Гаулесса (6). б) Результаты расчетов методом Монте-Карло при  $k_B T/t = 0.8$



**Рис. 2.** Фазовая диаграмма модели Хаббарда (1) в координатах  $\{q, \mu/U\}$  и  $\{q, \Theta\}$ . *а*) Расчет по теории среднего поля. Сплошные линии получены решением уравнения (2). Пунктирные линии соответствуют совместному решению системы уравнений (2), (3). *б*) Результаты расчетов методом Монте-Карло. Темные квадраты — фазовая диаграмма 2 + 1-мерной XY-модели (при целочисленных  $n = k \gg 1$ ) [34]. Вдоль пунктирной линии движется система при  $\{U/t, k_B T/t\} = \{3.5, 0.8\}$  и изменении химического потенциала  $\mu/U$  (см. ниже рис. 4, 5)

нему числу частиц на грануле  $n_0 = k$ , определяя область существования моттовского изолятора (I) [17]. Сверхтекучее состояние системы соответствует в этом пределе случаю несоизмеримого заполнения, т. е. нецелому среднему числу частиц на грануле. Рисунок 1а показывает, что при  $T = 0$  и полуцелых значениях химического потенциала  $\mu = 0.5 + k$ , сверхпроводящее состояние существует при сколь угодно сильном взаимодействии между частицами, что согласуется с результатами работ [17, 18].

При конечных температурах увеличение силы взаимодействия бозонов переводит систему в разупорядоченное состояние при любых значениях химического потенциала (см. рис. 1а). Из рисунка также видно, что с ростом температуры область существо-

вания упорядоченного состояния сдвигается в сторону больших значений химического потенциала.

Переходу к случаю системы макроскопических гранул соответствуют увеличение плотности частиц  $n_0$  и уменьшение роли флуктуаций модуля параметра порядка. Проследить изменения, происходящие с системой (1) при увеличении  $n_0$ , удобнее всего на плоскости  $\{q, \Theta\}$ , где мы используем безразмерную температуру  $\Theta = k_B T / t n_0$  и квантовый параметр  $q = \sqrt{U / t n_0}$  — управляющие параметры, определяющие также состояние квантовой  $XY$ -модели. Соответствующая фазовая диаграмма показана на рис. 2а. Как видно из рисунка, для любых взаимодействий  $U$  оценка границы упорядоченного состояния модели Хаббарда по теории среднего поля лежит выше соответствующей границы квантовой  $XY$ -модели и приближается к ней с увеличением среднего числа заполнения  $n_0$  узлов решетки. Наш расчет подтверждает, что при  $n_0 \gg 1$  фазовая диаграмма периодична по параметру  $\mu/U$  [14].

Пунктирными линиями на рис. 2а показано семейство кривых, в точках которых система с плотностью  $n_0$  становится разупорядоченной. Точки их пересечения с линиями  $\Theta = \text{const}$  определяют фазовую диаграмму системы на плоскости  $\{q, \Theta\}$ , соответствующую  $n_0$  частицам на гранулу. Подобный анализ показывает, что при несоизмеримой плотности бозонов и малых температурах (см. ниже) упорядоченное (сверхпроводящее) состояние массива существует при сколь угодно больших значениях параметра  $q$ , т. е. сколь угодно большой величине квантовых флуктуаций фаз сверхпроводящего параметра порядка в терминах квантовой  $XY$ -модели.

Рассмотренный подход позволяет лишь качественно оценить характерные особенности фазовой диаграммы рассматриваемой системы. Сравнение с результатами численного моделирования показывает (см. ниже), что уравнения (2), (3) дают значительно завышенную оценку температуры  $\Theta_c(q; \mu/U)$  разупорядочения. Для получения более точных количественных оценок необходимо определить температуру исчезновения глобальной (а не локальной, как это делалось в изложенном выше методе) сверхтекучей плотности массива. Оценкой такой температуры может служить температура Костерлица–Таулесса топологического фазового перехода в соответствующей классической  $XY$ -модели, отображение на которую исходной системы производится разложением эффективного функционала Гинзбурга–Ландау относительно слабых флуктуаций фаз параметра порядка.

Используя подход работ [19, 24, 26], нетрудно показать, что эффективное действие искомой классической двумерной  $XY$ -модели имеет вид

$$S(\{\varphi_k\}) = \frac{J_{XY}}{2} \sum_k |\mathbf{k}|^2 \varphi_k \varphi_{-\mathbf{k}} \approx J_{XY} \sum_{\langle i,j \rangle} [1 - \cos(\varphi_i - \varphi_j)],$$

$$J_{XY} \left( \frac{\mu}{U}; \frac{t}{U}; \frac{k_B T}{t} \right) = \frac{t \Delta^2}{4},$$
(4)

где  $J_{XY}$  — константа связи эффективной  $XY$ -модели, зависящая от безразмерных параметров  $\mu/U$ ;  $t/U$ ;  $k_B T/t$ . Для локальной сверхтекучей плотности  $\Delta^2/4$  системы имеет место соотношение

$$\Delta = \frac{\text{Tr} \left\{ (\hat{a}^\dagger + \hat{a}) \exp(-\beta \hat{H}_{mf}) \right\}}{\text{Tr} \left\{ \exp(-\beta \hat{H}_{mf}) \right\}}, \quad (5)$$

$$\hat{H}_{mf} = \frac{U}{2} \hat{n}^2 + (2t - \mu) \hat{n} - t \Delta (\hat{a}^\dagger + \hat{a}).$$

Линия температур фазовых переходов Костерлица–Таулесса в эффективной ХУ-модели [27] определяет искомую границу сверхтекучего состояния рассматриваемого массива гранул:

$$k_B T_c = 0.98 J_{XY} (\mu/U; t/U; k_B T_c/t). \quad (6)$$

Результаты оценок по формулам (4), (5) показаны на рис. 1а штриховыми линиями. Отметим, что, хотя два изложенных выше подхода дают сходное качественное поведение границы упорядоченной фазы, температура топологического фазового перехода в эффективной ХУ-модели (6) оказывается значительно меньшей, чем температура исчезновения локальной сверхтекучей плотности, которая определяется из уравнения (2). Сравнение полученной таким образом фазовой диаграммы с результатами расчетов Монте-Карло (см. ниже и рис. 1) показывает их неплохое количественное согласие.

### 3. КВАНТОВЫЙ МЕТОД МОНТЕ-КАРЛО. ИЗМЕРЯЕМЫЕ ВЕЛИЧИНЫ

Применение процедуры дискретизации Троттера позволяет оценить все термодинамические средние операторов  $D$ -мерной квантовой системы по классической  $D + 1$ -мерной, причем бальцмановским весом конфигураций соответствующей классической системы служит произведение матричных элементов высокотемпературной матрицы плотности, вычисляемых приближенно. Для исследования свойств модели (1) мы использовали квантовый метод Монте-Карло в модификации «шахматная доска» (подробное изложение процедуры дискретизации и организации шага Монте-Карло при моделировании бозонных решеточных систем в большом каноническом ансамбле см. в [28]). В этом методе степенями свободы дискретизованной системы являются числа заполнения  $\{n_i^p\}$  узлов трехмерной решетки  $N \times N \times 4P$ , образованной  $4P$ -кратным размножением исходной решетки  $N \times N$  вдоль оси мнимого времени. Число разбиений  $P$  выбиралось таким образом, чтобы величина параметра  $\epsilon = q^2/P^2\Theta^2$ , характеризующего ошибку дискретизации, не превышала 0.06.

В каждой расчетной точке фазовой диаграммы, положение которой определяется параметрами  $\{\sqrt{U/t}, k_B T/t\}$  и химическим потенциалом  $\mu/U$ , рассчитывалась плотность  $\nu_s$  сверхтекучей компоненты. Для нахождения этой величины мы использовали как флуктуации топологического числа закручивания (winding number) [20, 28], так и корреляционную функцию парамагнитного тока [29]. Мы нашли, что когда среднее число частиц на гранулу  $n_0 < 2$  и  $q > 2$ , статистические ошибки второго метода значительно выше ошибок в определении сверхтекучей плотности через флуктуации числа закручивания, что делает его применение нецелесообразным.

Мы также измеряли величину  $n_0$ , которая управляется химическим потенциалом системы, и модуль сжимаемости  $\kappa$ , определяемый как

$$\kappa = k_B T \frac{\partial n_0}{\partial \mu} = \frac{1}{4PN^2} \left\langle \sum_{p=0}^{4P-1} \sum_i (n_i^p)^2 \right\rangle - (n_0)^2. \quad (7)$$

Оказалось удобным проводить измерения при  $U/t = \text{const}$  и  $k_B T/t = \text{const}$ , изменяя значение химического потенциала  $\mu/U$ . В качестве примера на рис. 2б в координатах  $\{q, \Theta\}$  показана линия, по которой движется система при  $\{U/t, k_B T/t\} = \{3.5, 0.8\}$ . Положение системы на этой линии при данном значении химического потенциала можно определить, измерив среднее число частиц на гранулу  $n_0$ . Кроме того, мы провели ряд расчетов при фиксированном  $n_0$  (в каноническом ансамбле). Можно ожидать, что при одинаковой плотности частиц  $n_0$  результаты моделирования не будут зависеть от выбора ансамбля для систем достаточно большого размера. Мы проверили это предположение и нашли, что в интересующей нас области изменения управляющих параметров, для системы размера  $N \times N = 6 \times 6$  различие в измеряемых величинах не превышает 10%, что позволяет при анализе результатов одновременно использовать данные, полученные заданием плотности  $n_0$  (в рамках канонического распределения) и химического потенциала (что соответствует использованию большого канонического ансамбля).

#### 4. ОПИСАНИЕ И ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Рассмотрим сначала результаты расчетов в области  $q < 1.5$ , когда взаимодействие между частицами слабое и теория среднего поля (см. рис. 1а, 2а) предсказывает монотонную зависимость температуры фазового перехода от плотности частиц  $n_0$ . На рис. 3 представлены результаты расчетов плотности сверхтекучей компоненты как функции среднего числа заполнения,  $\nu_s(n_0)$ , при  $q = 1, \Theta = 1$  (светлые символы). С ростом числа заполнения значение  $\nu_s$  выходит на константу, равную модулю спиральности (helicity modulus)  $\gamma(q, \Theta)$  в 2 + 1-мерной (квантовой) XY-модели [30, 31]. Ранее мы нашли [23],

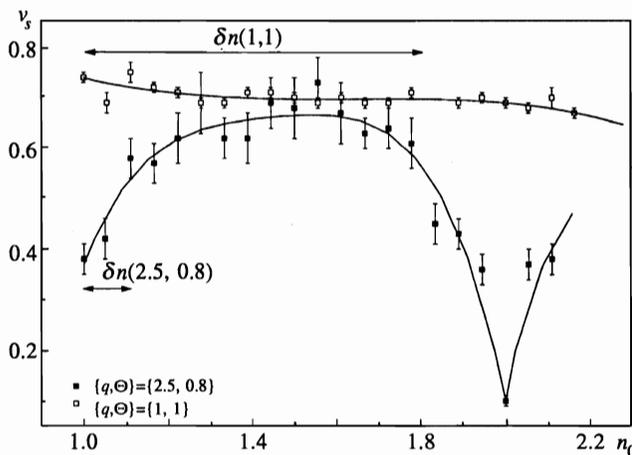


Рис. 3. Зависимости доли сверхтекучей компоненты  $\nu_s$  от среднего числа заполнения  $n_0$ . Сплошными линиями показаны результаты интерполяции данных полиномами четвертой степени. Размер стрелок соответствует оценкам  $\delta n(q, \Theta) = \kappa(q, \Theta)|_{n_0=1}$ , см. (8)

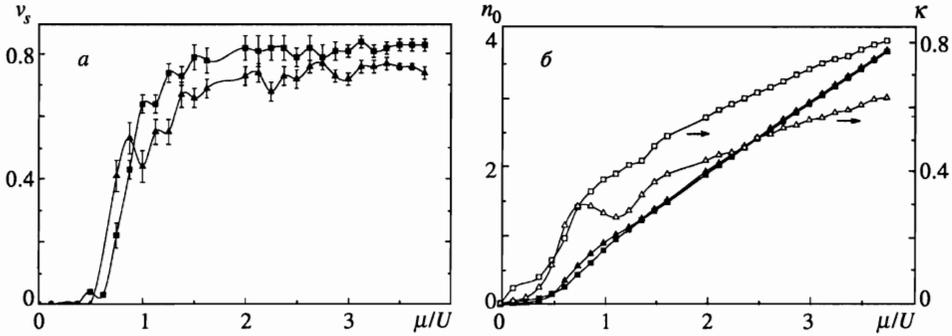
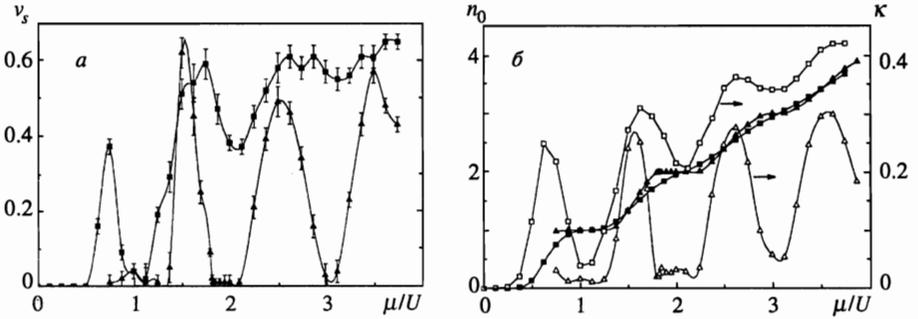


Рис. 4. а) Зависимость сверхтекучей плотности  $\nu_s$  от химического потенциала  $\mu/U$ . б) Зависимости среднего числа частиц  $n_0$  (темные символы) и модуля сжимаемости  $\kappa$  (светлые символы) от химического потенциала  $\mu/U$ : квадраты —  $\{U/t, k_B T/t\} = \{2.0, 0.8\}$ ; треугольники —  $\{U/t, k_B T/t\} = \{2.5, 0.8\}$ . Интерполяция сплайнами проведена для удобства рассмотрения. Неуказанные статистические ошибки меньше размеров соответствующих символов

что в данной области фазовой диаграммы фактический выход на этот предел, соответствующий малой роли квантовых флуктуаций модуля параметра порядка, происходит уже при  $n_0 = 4 \div 5$ . Монотонность зависимости  $\nu_s(n_0)$  позволяет заключить, что результаты опытов над системой изолированных гранул не будут сильно отличаться от результатов, полученных для системы гранул на подложке с приложенным к ней потенциалом. Оказалось, что подобным образом система ведет себя вплоть до  $q \simeq 2.3$ . С дальнейшим ростом квантового параметра  $q$  и понижением температуры  $\Theta$  функция  $\nu_s(n_0)$  перестает быть монотонной функцией среднего числа заполнения  $n_0$ . На рис. 3 ( $\{q, \Theta\} = \{2.75, 0.5\}$ , темные символы) заметны характерные осцилляции зависимости  $\nu_s(n_0)$ , причем минимумы достигаются при целых значениях  $n_0 = k$ . При достаточно больших плотностях бозонов ( $n_0 > 7$  в области  $\{q, \Theta\} \approx \{2.5, 0.5\}$ , см. [23]) осуществляется переход к квазиклассическому пределу и плотность сверхтекучей компоненты  $\nu_s(n_0)$  будет периодической функцией среднего числа заполнения с периодом единица [14].

На рис. 4а показаны графики зависимостей сверхтекучей плотности от химического потенциала системы, пропорционального приложенному к подложке напряжению. Квадраты относятся к системе при  $\sqrt{U}/t = 2$ ,  $k_B T/t = 0.8$ , треугольники —  $\sqrt{U}/t = 2.5$ ,  $k_B T/t = 0.8$ . Особенность при  $n_0 \simeq 1$  (провал в графиках  $\nu_s(\mu/U)$  и  $\kappa(\mu/U)$  при  $\mu/U \simeq 1.2$ ), плохо заметная при  $q \simeq 2$  (квадраты на рис. 4) становится ясно выраженной при  $q \simeq 2.5$  (треугольники). Рисунок подтверждает, что случаю соизмеримых заполнений соответствуют меньшие величины плотности сверхтекучей компоненты, т. е. увеличение отстройки средней плотности бозонов от целочисленных значений  $n_0 = k$  приводит к расширению фазовой диаграммы модели (1) на плоскости  $\{q, \Theta\}$ .

При дальнейшем увеличении величины квантового параметра  $q$  различия в свойствах системы при целых и нецелых плотностях бозонов становятся все более существенными. Действительно, рассматривая результаты вычислений по теории среднего поля (см. рис. 1а), можно предположить, что существует некоторое значение параметра  $U/t$ , при котором линия  $\sqrt{U}/t = \text{const}$  пересекает область разупорядоченного состояния с  $n_0 \simeq 1$ . Дальнейшее увеличение константы взаимодействия  $U$  должно приводить к



**Рис. 5.** а) Зависимость сверхтекучей плотности  $\nu_s$  от химического потенциала  $\mu/U$ . б) Зависимости среднего числа частиц  $n_0$  (темные символы) и модуля сжимаемости  $\kappa$  (светлые символы) от химического потенциала  $\mu/U$ : квадраты —  $\{U/t, k_B T/t\} = \{3.5, 0.8\}$ ; треугольники —  $\{U/t, k_B T/t\} = \{5.0, 0.8\}$

возможности пересечения также и разупорядоченной области с  $n_0 \simeq 2$  и т. д. Результаты расчетов, представленные на рис. 5, подтверждают это предположение. Заметим, что при  $\sqrt{U/t} = 5.0$  (треугольники на рис. 5) и целых значениях параметра  $\mu/U$  изменение химического потенциала практически не приводит к изменению среднего числа частиц на узлах системы. Эту особенность, характерную для диэлектрика, можно также видеть из рис. 5б, на котором приведена зависимость модуля сжимаемости  $\kappa$  от химического потенциала  $\mu/U$ .

При  $T = 0$  решеточная бозонная система в отсутствие беспорядка испытывает фазовый переход типа сверхпроводник–диэлектрик [17]. Применительно к исследуемой системе, можно предположить, что с повышением температуры область существования моттовского изолятора уменьшается и сдвигается в сторону больших  $U/t$ , так что при движении, например, вдоль линий  $\mu/U = k$  сверхтекучая фаза сменяется нормальной (металлической). Дальнейшее увеличение константы взаимодействия, когда величина моттовской диэлектрической щели возрастает настолько, что тепловые возбуждения становятся несущественными, приведет к кроссоверному установлению состояния изолятора [32]. Оценка положения границы состояния изолятора при  $n_0 = 1$ , определенная из наших расчетов, показана на рис. 1б. Для сравнения приведены также несколько линий постоянной плотности  $n_0 = \text{const}$ . Более подробное исследование перехода металл–изолятор кроссоверного типа требует рассмотрения систем значительно больших размеров (см. [24, 33, 34]).

Анализ рис. 1–5 приводит к выводу, что интересные эффекты, вызванные несоизмеримостью заполнения узлов системы, существуют лишь в достаточно сильно взаимодействующих системах и при достаточно низких температурах. Для бозонной модели Хаббарда (1) область их существования может быть оценена неравенствами  $q > 2.3$ ,  $\Theta < 0.7$ . Количественно величину отстройки  $\delta n$  среднего числа частиц от целочисленного значения  $n_0 = k$ , при которой будет наблюдаться значительное изменение свойств системы, можно выразить через модуль сжимаемости:

$$\delta n \approx \left. \frac{\partial n_0}{\partial \mu} \right|_{n_0=k} k_B T = \kappa|_{n_0=k}. \quad (8)$$

Известно, что модуль сжимаемости (обратно пропорциональный флуктуациям фаз в  $2+1$ -мерной  $XY$ -модели, см. (7)) значительно убывает с ростом величины квантового параметра  $q$  и с уменьшением температуры  $\Theta$ . Мы нашли, что при  $n_0 = 1$  для модели Хаббарда (1) справедливы следующие оценки:  $\delta n \approx 1.2$  при  $\{q, \Theta\} \approx \{0.5, 1\}$ ;  $\delta n \approx 0.3$  при  $\{q, \Theta\} \approx \{2.5, 0.8\}$ , тогда как в области  $\{q, \Theta\} \approx \{2.75, 0.5\}$  имеем  $\delta n \approx 0.06$ . В качестве иллюстрации на рис. 3 показаны величины  $\delta n(q, \Theta)$ , найденные для точек  $\{q, \Theta\} = \{1, 1\}$  (светлые символы) и  $\{q, \Theta\} = \{2.5, 0.8\}$  (темные символы). Рисунок демонстрирует неплохое соответствие между теоретической оценкой (8) и результатами расчетов Монте-Карло.

Из изложенных выше результатов следует фазовая диаграмма системы, показанная на рис. 1б (в координатах  $\{\sqrt{U/t}, \mu/T\}$  при  $k_B T/t = 0.8$ ) и рис. 2б (в координатах  $\{q, \Theta\}$ ). Положение границы упорядоченного сверхпроводящего состояния оценивалось по универсальному скачку сверхтекучей плотности [30] и по положению пика ее температурной производной [35].

Квантовые фазовые переходы (при  $T = 0$ ) в двумерной модели Хаббарда (1) определяются критическими свойствами соответствующей эффективной трехмерной системы [17, 32]. При конечных температурах джозефсоновский массив будет проявлять костерлиц–таулессовское критическое поведение на некоторой линии  $\Theta_c(\mu/U, q)$ . Попробуем оценить влияние квантовых флуктуаций на температуру этого перехода, предполагая ее достаточно малой (см. ниже). Интерес представляют два случая: а) система находится при соизмеримой плотности частиц  $n_0 = k$  и при некоторой температуре  $\Theta_c(q)$  переходит из сверхпроводящего состояния в нормальное; б) фазовый переход при температуре  $\Theta_c(n_0)$  происходит вследствие изменения плотности  $n_0$ .

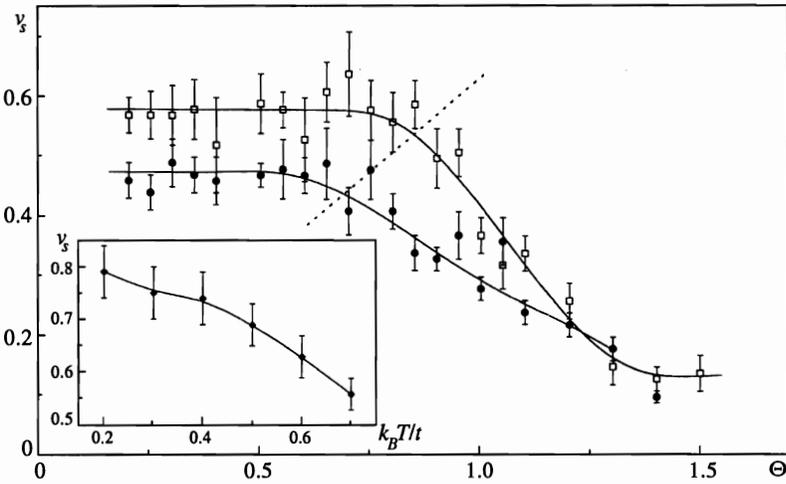
Для области вблизи точки  $q_c^{XY} \approx 2.5$  квантового перехода  $2+1$ -мерной  $XY$ -модели (см. рис. 2б) для температуры  $\Theta_c(q)$  топологического фазового перехода Костерлица–Таулесса в работе [24] была получена оценка  $\Theta_c(q) \sim |q - q_c^{XY}|^{\zeta_1}$  с показателем  $\zeta_1 \approx 0.67$ . При выводе этой оценки предполагалось, что температура системы меньше температуры  $2D \rightarrow 3D$ -кроссовера:  $\Theta \leq \Theta_{3D}$ ,  $\Theta_{3D} \sim |q - q_c^{XY}|^\nu$  при  $\nu \approx \zeta_1$ . Это позволило оценить плотность сверхтекучей компоненты  $\nu_s(q, \Theta)$ , определяющую температуру  $\Theta_c(q)$  фазового перехода, как  $\nu_s(q, \Theta) \approx \nu_s(q, 0)$ . Очевидно, что подобные рассуждения, справедливы также и в окрестности точек  $q_c^H|_{n_0=k}$  квантовых фазовых переходов модели Хаббарда (1) при целочисленном заполнении гранул массива  $n_0 = k$  ( $q_c^H|_{n_0=1} \approx 2.8$ , см. [20]). Следовательно, можно ожидать, что имеет место соотношение

$$\Theta_c(q; k) \sim \left| q_c^H|_{n_0=k} - q \right|^{0.67}. \quad (9)$$

Аналогичные рассуждения можно применить и к случаю несоизмеримой плотности бозонов  $n_0 \neq k$ . Как показано в работах [17, 20], в области  $q > q_c^H$  справедливо соотношение  $\nu_s \sim |n_0 - k|^{\zeta_2}$  с  $\zeta_2 \approx 1.0$ . Следовательно, для температуры  $\Theta_c(n_0)$  топологического фазового перехода Костерлица–Таулесса имеет место соотношение

$$\Theta_c(n_0) \sim |n - k|^{1.0}. \quad (10)$$

Наши квантовые расчеты качественно согласуются с предсказаниями (9) и (10), однако подтвердить их справедливость с достаточной точностью затруднительно вследствие значительных ошибок в определении положения линии квантовых фазовых переходов  $\mu(U/t; T = 0)$ .



**Рис. 6.** Сверхтекучая плотность системы как функция температуры  $\Theta = k_B T / t n_0$  при  $q = 3.0$ : светлые символы —  $n_0 = 1.306$ ; темные символы —  $n_0 = 1.194$ . Штриховой линией показана прямая  $\nu_s = 2\Theta/\pi$ . На вставке приведены результаты расчетов сверхтекучей плотности системы как функции  $k_B T / t$  при  $\sqrt{U}/t = 2.5$  и  $\mu/U = 0.75$

Большой интерес вызывает вопрос о существовании эффектов возвратной сверхпроводимости, когда в некоторой области изменения квантового параметра  $q$  разупорядочение наступает не только с повышением, но и с понижением температуры  $\Theta$ . Существование возвратных эффектов неоднократно предсказывалось в рамках квантовой ХУ-модели (см. работу [13] и ссылки в ней), причем, насколько известно авторам, компьютерное моделирование не позволяет с однозначностью подтвердить [31, 36] или опровергнуть [34] существование этого явления. Проведенные ранее численные расчеты модели Хаббарда не обнаружили эффектов низкотемпературной нестабильности или возвратной сверхпроводимости [20, 23]. В настоящей работе мы исследовали низкотемпературную область  $q \approx 2.5$ ,  $\Theta < 0.5$  бозонной модели Хаббарда как при различных целых числах заполнения, так и при фиксированном значении химического потенциала. Результаты, представленные на рис. 6, показывают отсутствие эффектов возвратной сверхпроводимости, по крайней мере в исследованной области изменения управляющих параметров. Особое внимание было уделено области  $\{\sqrt{U}/t, \mu/U\} \approx \{2.5, 0.8\}$ , в которой было предсказано низкотемпературное разупорядочение [19]. Результаты численного моделирования ясно показали отсутствие подобных эффектов в данной области. Более того, не согласуется с этими предсказаниями и проведенный нами расчет границы упорядоченного состояния в рамках теории среднего поля (см. разд. 2). Отметим, что уравнение (2), определяющее границу упорядоченного состояния, в данном методе является более аккуратным, чем использованное в цитированной работе, в том смысле, что при его выводе не делалось предположение  $n_0 \gg 1$  (последнее справедливо при  $\mu/U \gg 1$  [19]).

Подводя итоги, изложим основные результаты работы. В рамках бозонной решеточной модели Хаббарда мы провели анализ влияния квантовых флуктуаций фазы и модуля сверхпроводящего или сверхтекучего параметра порядка на характер упорядочения в двумерных мезоскопических джозефсоновских и гранулированных системах. Числен-

ный расчет квантовым методом Монте-Карло показал, что характер изменений свойств системы, вызванных модуляцией среднего числа заполнения элементов массива химическим потенциалом (потенциалом подложки), определяется параметром  $q = \sqrt{U}/tn_0$  (т. е. отношением характерной кулоновской энергии заряда гранулы к энергии джозефсоновского туннелирования). В области  $q < 1.5$ , которая является квазиклассической для квантовой ХУ-модели и областью сильных флуктуаций модуля параметра порядка для модели Хаббарда (1), свойства системы нечувствительны к среднему числу частиц на гранулах. В области значительных квантовых флуктуаций параметра порядка ( $q > 2$ ,  $\Theta < 0.8$ ) мы нашли зависимость (более ярко выраженную при меньших температурах) состояния системы от среднего числа частиц в ней.

Работа была поддержана грантами Российского фонда фундаментальных исследований и программой «Физика твердотельных наноструктур».

## Литература

1. F. J. Nacker and J. Dupont-Roc, Phys. Rev. Lett. **67**, 2966 (1991).
2. J. D. Reppy, J. Low. Temp. Phys. **67**, 207 (1992).
3. H. S. J. van der Zant, F. C. Fritschy, J. E. Mooij et al., Phys. Rev. Lett. **69**, 2971 (1992); J. E. Mooij, R. Fazio, G. Shön et al., Phys. Rev. Lett. **65**, 645 (1990).
4. В. Ф. Гантмахер, В. М. Теплинский, В. Н. Зверев, Письма в ЖЭТФ **62**, 873 (1995).
5. A. F. Hebard and M. A. Paalanen, Phys. Rev. Lett. **65**, 927 (1990).
6. A. L. Dobryakov, Yu. E. Lozovik, A. A. Puretzky et al., Appl. Phys. A **54**, 100 (1992).
7. Yu. M. Mucharsky, A. Loshak, K. Schwab et al., Czech. J. Phys. **46**, 115 (1996); S. V. Pereversev, A. Loshak, S. Backhaus et al., Nature **388**, 449 (1997).
8. M. N. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Mathews et al., Science **269**, 198 (1995).
9. C. C. Bradley, C. A. Sackoff, J. J. Tollett et al., Phys. Rev. Lett. **75**, 1687 (1995).
10. K. B. Davis, M.-O. Mewes, M. R. Andrew et al., Phys. Rev. Lett. **75**, 3969 (1995).
11. M. R. Andrews, C. G. Townsend, H.-J. Miesner et al., Science **275**, 637 (1997).
12. Yu. E. Lozovik, submitted to Physica E; Ю. Е. Лозовик, О. Л. Берман, ЖЭТФ **111**, 1879 (1997); Yu. E. Lozovik, O. L. Berman, and V. G. Tsvetus, Pis'ma ZhETF **66**, 332 (1997).
13. J. B. Kim and M. Y. Choi, Phys. Rev. B **52**, 3624 (1995); B. J. Kim, J. Kim, M. Y. Choi et al., Phys. Rev. B **56**, 395 (1997).
14. C. Bruder, R. Fazio, A. P. Kampf et al., Phys. Scr. **T42**, 159 (1992).
15. I. E. Dzyaloshinskii, E. M. Lifshitz, and L. P. Pitaevskii, Adv. Phys. **10**, 165 (1961).
16. G. T. Zimanyi, P. A. Crowell, R. T. Scalettar et al., Phys. Rev. B **50**, 6515 (1994).
17. M. P. A. Fisher and G. Grinstein, Phys. Rev. Lett. **60**, 208 (1988); M. P. A. Fisher, P. B. Weichman, G. Grinstein, and D. S. Fisher, Phys. Rev. B **40**, 546 (1989); M. P. A. Fisher, G. Grinstein, and S. M. Girvin, Phys. Rev. Lett. **64**, 587 (1990).
18. M. C. Cha, M. P. A. Fisher, S. M. Girvin et al., Phys. Rev. B **44**, 6883 (1991).
19. A. P. Kampf and G. T. Zimanyi, Phys. Rev. B **47**, 279 (1993).
20. W. Krauth, N. Trivedi, and D. Ceperley, Phys. Rev. Lett. **67**, 2703 (1991); W. Krauth and N. Trivedi, Europhys. Lett. **14**, 627 (1991).
21. В. А. Кашурников, А. В. Красавин, Б. В. Свистунов, Письма в ЖЭТФ **64**, 92 (1996).
22. A. V. Otterlo and K. H. Wagenblast, Phys. Rev. Lett. **72**, 3598 (1994); E. Roddick and D. Stroud, Phys. Rev. B **51**, 8672 (1995).
23. А. И. Белоусов, С. А. Верзаков, Ю. Е. Лозовик, ЖЭТФ **113**, 261 (1998); А. И. Белоусов, Ю. Е. Лозовик, Письма в ЖЭТФ **66**, 649 (1997).

24. S. Doniach, Phys. Rev. B **24**, 5063 (1981).
25. В. Н. Попов, *Континуальные интегралы в квантовой теории поля и статистической физике*, Атомиздат, Москва (1976).
26. J. J. Alvarez and C. A. Balseiro, Sol. St. Comm. **98**, 313 (1996).
27. P. Olsson, Phys. Rev. B **52**, 4511 (1995).
28. A. Blaer and J. Han, Phys. Rev. A **46**, 3225 (1992).
29. G. G. Batrouni, B. Larson, R. T. Scalettar et al., Phys. Rev. B **48**, 9628 (1993).
30. P. Minnhagen, Rev. Mod. Phys. **59**, 1001 (1987).
31. M. Jacobs, J. V. Jose, M. A. Novotny et al., Phys. Rev. B **38**, 4562 (1988).
32. S. L. Sondhi, S. M. Girvin, J. P. Carini et al., Rev. Mod. Phys. **69**, 315 (1997).
33. Yu. E. Lozovik and S. G. Akopov, J. Phys. C **14**, L31 (1981); S. G. Akopov and Yu. E. Lozovik, J. Phys. C **15**, 4403 (1982).
34. A. I. Belousov and Yu. E. Lozovik, Sol. St. Comm. **100**, 421 (1996); А. И. Белоусов, Ю. Е. Лозовик, ФТТ **39**, 1513 (1997); С. А. Верзаков, Ю. Е. Лозовик, ФТТ **35**, 818 (1997).
35. F. F. Assaad, W. Hanke, and D. J. Scalapino, Phys. Rev. B **50**, 12835 (1994).
36. D. Marx and P. Nielaba, J. Chem. Phys. **102**, 4538 (1995).