

ІНСТИТУТ  
ФІЗИКИ  
КОНДЕНСОВАНИХ  
СИСТЕМ

ICMP-05-20U

О. Забуранний

Дискретні моделі опису поверхні і їхні квантові спінові  
відповідники

ЛЬВІВ

УДК: 532.6

PACS: 68.35.Ct, 68.60.Dv

**Дискретні моделі опису поверхні і їхні квантові спінові відповідники**

О. Забуранний

**Анотація.** При зміні температури чи під дією зовнішніх параметрів кристалічні поверхні можуть зазнавати фазових переходів. В препринті оглянуто роботи що стосуються дискретних ґраткових моделей поверхні, які можуть описувати переходи між гладкими, шорсткими, реконструйованими та неупорядкованою гладкою фазами. Особливу увагу присвячено методі трансфер-матриці за допомогою якого можна звести дослідження температурної поведінки ґраткових дискретних SOS моделей до вивчення основного стану квантових одновимірних систем. Співставлено параметри порядку для поверхневих фаз і фаз квантових спінових систем; встановлено залежність між асимптотичною поведінкою кореляційних функцій висота-висота та спінових кореляційних функцій.

**Discrete lattice surface models and their quantum spin counterparts**

O. Zaborannyi

**Abstract.** At the change of temperature or under the action of external parameters crystalline surfaces can undergo phase transitions. In present paper the works considering the discrete lattice models are examined. The advantage of discrete lattice models is a possibility to describe the flat, rough, reconstructed and disordered flat phases. The special attention is devoted to the transfer-matrix method which permits to reduce the study of temperature behavior of SOS models to the ground-state problem of one-dimensional quantum systems. The order parameters for the surface and quantum spin chains phases are compared; a correspondence between the asymptotic of height-height correlations functions and spin correlation functions is set.

**Подається в** Condensed Matter Physics  
**Submitted to** Condensed Matter Physics

© Інститут фізики конденсованих систем 2005  
Institute for Condensed Matter Physics 2005



## 1. Вступ

Зазвичай поверхня кристалічної речовини має періодичну структуру, що тісно пов'язана з об'ємним геометричним впорядкуванням. Однак, існують випадки, коли поверхня може зазнавати фазових переходів при незмінній об'ємній структурі ґратки. Фазові переходи на поверхні можуть викликатися зміною температури, тиску чи введенням адсорбату. Типи фазових переходів також можуть бути різними. Це може бути поява нової симетрії на поверхні кристалу (утворення реконструйованих низькотемпературних фаз, чи невпорядкованої гладкої фази), зміна однієї симетрії - іншою (переходи між різними реконструйованими фазами), перетворення гладкої поверхні, що відповідає певній кристалічній площині на шорстку (roughening, шорсткування), коли товщина поверхні стає макроскопічною величиною і зникає орієнтація поверхні вздовж кристалічної площини. На сьогоднішній день фазові переходи на поверхні виявлені у багатьох сполуках. Найповніше фазові переходи на поверхні вивчені у металах. Експериментально встановлено, що у важких шляхетних металах (наприклад Au [1], [2], [3]; Pt [4]) існує низькотемпературна реконструйована фаза [1x2] - порядок якої полягає в подвоєнні періоду ґратки на площині в напрямі (001), гладка фаза і шорстка фаза, тоді як в деяких напів-шляхетних і легких шляхетних металах (Cu, Ag, Ni, Pd) - існує лише перехід від гладкої до шорсткої фази [5], [6], [7], [8]. Фазові переходи реконструкції також спостерігаються на поверхні тонких плівок інертних газів (Ar, Kr, Xe) на графітній підкладці [9], [10].

Реконструкція і шорсткування присутні у поведінці площин (100) кристалів типу CsCl [11], але тут подвоєння періоду ґратки при реконструкції виникає в обидвох напрямках поверхні. Реконструйована фаза володіє симетрією [2x2]. Ще складніші структури утворюються на (110) поверхнях напівпровідників типу III-V [12], [13].

Фазові переходи на поверхні виявлені в набагато ширшому класі сполук, однак ми звертаємо увагу тенденційно лише на ті, в яких присутня і шоркування і реконструкція (принаймні як збурення яке може і не привести до утворення стійкої реконструйованої фази). Справа в тому, що саме в таких сполуках може виникати невпорядкована гладка фаза, яка є в останні роки предметом особливо інтенсивних досліджень.

Для опису перерахованих сполук добре підходять дискретні моделі 'тверде тіло на твердому тілі' (solid on solid) [14]. SOS моделі є класичними, моделями в яких поверхня описується набором дискре-

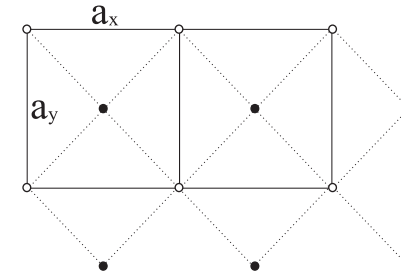


Рис. 1. Поверхня 110 об'ємноцентрованої ґратки. Світлі і темні атоми належать до двох підґраток які зсунуті одна відносно одної на пів періоду.

тних висот  $h_{i,j}$ , означених на двовимірній ґратці. Взаємодія вводиться так, щоб стабілізувати гладку поверхню - збільшується з різницею висот, що відповідають двом вузлам. Загальною рисою моделей SOS є те, що при низьких температурах поверхня залишається гладкою, при збільшенні температури появляются термодинамічні відхилення - тераси і западини. При малих температурах форма терас є простою, оскільки складність форми збільшує їх енергію, але при збільшенні температури, коли відхилення починають взаємодіяти, їх форма ускладнюється. Врешті при певній критичній температурі  $T_c$  відбувається фазовий перехід шорсткування.

Найпростішою серед SOS моделей є BCSOS модель (рис. 1), в якій різниця між висотами на сусідніх вузлах може мати значення  $\pm \frac{1}{2}$ . Ця модель може бути використана для вивчення шоркування (100) поверхні об'ємноцентрованої ґратки чи (110) поверхні гранецентрованої ґратки. Взаємодія може бути введена між найближчими, чи дальшими ніж найближчі сусіди. гамільтоніан для BCSOS моделі із взаємодією найближчих сусідів ( $K_{2x}$ ,  $K_{2y}$ )

$$H = \sum_{i,j} \left[ K_{2x} (h_{i,j} - h_{i+2,j})^2 + K_{2y} (h_{i,j} - h_{i,j+1})^2 \right] \quad (1.1)$$

допускає точний розв'язок. В 1977 році ван Бейерен [15] вказав на еквівалентність BCSOS моделі шестивершинній моделі, що дозволяє знайти температуру шорсткування

$$e^{-K_{2x}/T_c} + e^{-K_{2y}/T_c} = 1 \quad (1.2)$$

(в шестивершинній моделі це температура фазового переходу між

антисегнетоелектричною і непорядкованими фазами [17]). Перехід між гладкою і шорсткими фазами є переходом типу Костерліца-Таулеса. Крім описаного тут найпростішого сценарію SOS моделі можуть зазнавати кількох фазових переходів, використовуватись для опису взаємовпливу адсорбції і шорсткування чи реконструкції [16].

Реалізація саме такого переходу додатково підігриває інтерес до фазових переходів на поверхні, оскільки перехід Костерліца-Таулеса є дуже м'яким фазовим переходом - вільна енергія  $f$  і всі її похідні не мають сингулярностей при  $T = T_c$  ( $f \sim e^{-\alpha/\sqrt{T-T_c}}$ ) [17]. Хоча точний розв'язок допускає лише BCSOS модель інші моделі (RSOS - де різниця висот - 0,  $\pm 1$ , DGSOS - де взаємодія пропорційна квадрату різниці висот [14] також вказують на те, що перехід від гладкої до шорсткої фази є переходом безмежного порядку Костерліца-Таулеса.

Новим поштовхом у вивченні фазових переходів з температурою на поверхні кристалів було співставлення RSOS моделей квантовим спіновим одновимірним системам. Основною ідеєю є добре відома [18] еквівалентність між класичною термодинамічною задачею в  $D$  вимірах і пошуком основного стану для відповідного гамільтоніану в  $D - 1$  вимірі. В 1989 році ден Нійс і Ромелс [20] представили роботу, де встановлюється відповідність між RSOS моделлю (придатною для опису поверхні (100) простої кубічної ґратки) і квантовим спіновим ланцюжком зі спіном 1. Показано, що термодинаміка SOS моделі з обмеженням різниці висот між сусідніми вузлами не перевищує S - відповідає пошуку основного стану для спін-S квантового ланцюжка. Іншим значним аспектом роботи [20] є те, що передбачено виникнення непорядкованої гладкої фази (DOF) і важливість взаємодії між дальшими ніж найближчі вузли в утворенні реконструйованої і непорядкованої гладкої фаз.

Ідея роботи [20], але прикладена до BCSOS моделі, обговорення DOF фази є основним напрямком цього препринту.

## 2. Метод трансфер-матриці

В цьому розділі ми коротко нагадаємо метод трансфер-матриці для класичних систем, які описуються набором дискретних значень  $\sigma_{n,m}$  на двовимірній ґратці. Кожна величина  $\sigma_{n,m}$  може мати  $p$  значень. Припустимо, що гамільтоніан можна розбити на дві частини, що описують взаємодію між вузлами в горизонтальному і вертикальному напрямках (рис. 2). Взаємодії вздовж рядків входять в доданки  $H^x$ , кожен з яких залежить від значень змінних  $\sigma$  на рядку  $n$ :  $H^x(\sigma_{n,1}, \sigma_{n,2}, \dots, \sigma_{n,M}) \equiv H^x(\{\sigma_n\})$ . Взаємодії між двома сусідніми

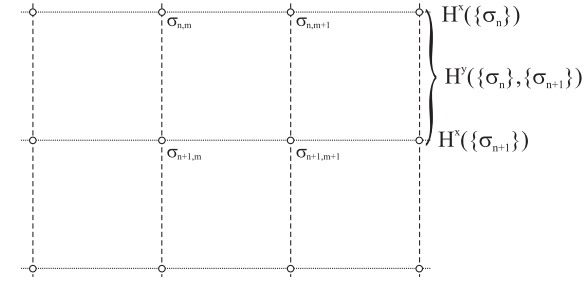


Рис. 2. Взаємодії у двовимірній моделі, що допускають застосування методу трансфер-матриці .

рядками входять в доданки  $H^y(\{\sigma_n\}, \{\sigma_{n+1}\})$  які залежать від значень  $\sigma$  на двох сусідніх рядках  $n$  та  $n + 1$ .

$$H = \sum_{n=1}^{N+1} [H^x(\{\sigma_n\}) + H^y(\{\sigma_n\}, \{\sigma_{n+1}\})] \quad (2.1)$$

Статистична сума відповідно, запишеться

$$Z = \sum_{\sigma_{1,1}} \sum_{\sigma_{1,2}} \dots \sum_{\sigma_{N,M}} e^{-\beta \sum_{n=1}^{N+1} [H^x(\{\sigma_n\}) + H^y(\{\sigma_n\}, \{\sigma_{n+1}\})]} \quad (2.2)$$

згрупуємо сумування за конфігураціями по рядках

$$Z = \sum_{\{\sigma_1\}} \sum_{\{\sigma_2\}} \dots \sum_{\{\sigma_N\}} T_{\{\sigma_2\}}^{\{\sigma_1\}} T_{\{\sigma_3\}}^{\{\sigma_2\}} \dots T_{\{\sigma_{N+1}\}}^{\{\sigma_N\}} \quad (2.3)$$

де  $T \equiv T_{\{\sigma_{n+1}\}}^{\{\sigma_n\}} = e^{-\beta [H^x(\{\sigma_n\}) + H^y(\{\sigma_n\}, \{\sigma_{n+1}\})]}$ . Величина  $T$  залежить від  $2M$  змінних  $\sigma_{n,m}$  означених на двох сусідніх рядках - всього  $(p^M \times p^M)$  можливих значень. Якщо ми розглядатимемо  $T$  як матрицю і покладемо періодичні граничні умови  $\{\sigma_{N+1}\} = \{\sigma_1\}$ , то кожне сумування по спільних індексах в (2.3) є перемноженням матриць, а останнє за конфігураціями  $\{\sigma_1\}$  - взяттям сліду, тому

$$Z = \text{Sp} T^N = \text{Sp}(T^x T^y)^N, \quad (2.4)$$

де  $T^x = e^{-\beta H_x(\{\sigma_n\})}$  — діагональна частина трансфер-матриці, яка залежить від енергії конфігурації на рядку  $n$ ,  $T^y = e^{-\beta H_y(\{\sigma_n\}, \{\sigma_{n+1}\})}$  - позадіагональна частина, що залежить від енергії взаємодії між

рядками при різних конфігураціях. При обчисленні трансфер-матриці ключовими моментами є обчислення  $T^y$ . Слід зауважити, що матриці  $T^x$  та  $T^y$  не комутують.

Суть зведення класичної моделі в двох вимірах, до квантової в одному полягає в тому, що ми повинні вміти знайти оператор трансфер-матриці  $\hat{T}$  матричне представлення якого в певному просторі буде рівне  $T$ . Матриця  $T$  залежить від конфігурації двох сусідніх рядків. Кожній з конфігурацій  $\{\sigma_n\}$  ми співставляємо вектор простору  $|i\rangle$ , на якому буде означений оператор  $\hat{T}$ . Матричний елемент  $\hat{T}_{i,j}$  повинен бути рівний матричному елементові  $T$  при конфігураціях сусідніх рядків, що відповідають станам  $|i\rangle$  та  $|j\rangle$ .

Запишемо вільну енергію на один рядок в термодинамічній границі  $N \rightarrow \infty$

$$f = -\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N\beta} \ln \text{Sp} T^N = -\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N\beta} \ln \sum_{j=1}^M \Lambda_j^N = -\frac{1}{\beta} \ln \Lambda_{\max}(\beta), \quad (2.5)$$

де  $\Lambda_j$  - власні значення матриці  $T$  а  $\Lambda_{\max}(\beta)$  - найбільше з них, яке залежить від температури. Якщо ввести гамільтоніан який рівний логарифму трансфер-матриці класичної моделі,

$$\hat{H} = -\ln \hat{T}, \quad (2.6)$$

то вільна енергія (2.5) буде енергією основного стану (2.6)  $f = -\text{frac}1\beta E_{GS}$ . Отже, для дослідження поведінки в класичній моделі, нам потрібно дослідити поведінку при нульовій температурі квантової моделі (2.6).

### 3. Трансфер-матриця для BCSOS

У випадку SOS моделей ми будемо шукати гамільтоніан у спіновому просторі. Це буде гамільтоніан одновимірної спінової системи. Величина спіну буде залежати від обмеження, яке ми накладаємо на різницю висот між сусідніми висотами SOS моделі. В цьому розділі ми детально розглянемо BCSOS модель, а далі покажемо як метод діє для інших SOS моделей.

Поділимо поверхню на рядки так, як показано на рис. 3 (штрихована лінія). Це є найзручніший, але не єдиний можливий поділ на рядки для обчислення трансфер-матриці. Трансфер-матриця буде залежати від конфігурацій двох сусідніх рядків  $\{h_j\}$  і  $\{h'_j\}$ . Компоненту спіну співставимо різниці висот  $s_j^z = h_{j+1} - h_j$ .  $T^x$  - діагональна частина записується лише через різниці висот в одному,

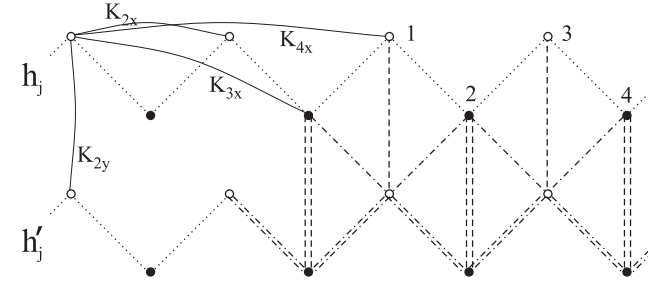


Рис. 3. BCSOS модель з взаємодіями  $K_{2x}$ ,  $K_{3x}$ ,  $K_{4x}$ ,  $K_{2y}$ . Поділ на рядки показаний пунктирною лінією. Штрих-пунктирній, штрихованій і подвійній штрихованій лініям відповідають дії операторів  $T^x$ ,  $T^y_{\text{odd}}$  і  $T^y_{\text{even}}$  відповідно.

нештрихованому рядку  $h_j$

$$T^x = \prod_j e^{-\beta K_{2x} \delta(|h_{j-1} - h_{j+1}| - 1)}. \quad (3.1)$$

Для того, щоб знайти позадіагональну компоненту  $T^y$  будемо шукати такий оператор, який діючи на нештрихований рядок дасть нам суму усіх допустимих конфігурацій штрихованого рядка з потрібними больцманівськими множниками. Очевидно, отримати допустимі конфігурації  $h'_j$  можна підіймаючи чи опускаючи певні висоти в  $h_j$  на одиницю, але пильнуючи, щоб не порушувалися умови, що різниці сусідніх висот не можуть перевищувати  $\frac{1}{2}$ .

Введемо оператор підняття і опускання висоти на вузлі  $j$

$$e^{\pm iU_j} |\dots h_j \dots\rangle = |\dots h_j \pm 1 \dots\rangle; \quad (3.2)$$

і проєкційний оператор, який забезпечує виконання BCSOS умови

$$P_{j,j+1} |\dots h_j, h_{j+1}, \dots\rangle = \begin{cases} |\dots h_j, h_{j+1}, \dots\rangle, & \text{якщо } |h_j - h_{j+1}| = \frac{1}{2}, \\ 0, & \text{якщо } |h_j - h_{j+1}| > \frac{1}{2}. \end{cases} \quad (3.3)$$

Розглянемо дію оператора

$$T^y_{\text{odd}} = \prod_{j=\text{odd}} P_{j-1,j} P_{j,j+1} (1 + e^{-\beta K_{2y}} e^{iU_j} + e^{-\beta K_{2y}} e^{-iU_j}),$$

$$T^y_{\text{even}} = \prod_{j=\text{even}} P_{j-1,j} P_{j,j+1} (1 + e^{-\beta K_{2y}} e^{iU_j} + e^{-\beta K_{2y}} e^{-iU_j}). \quad (3.4)$$

В результаті дії кожного множника в (3.4) на певний стан  $|\{h_j\}\rangle$  ми отримуємо суму трьох станів: тотожного, з піднятим і опущеним вузлом на одиницю. Проекційні оператори забезпечать відсутність в сумі двох останніх доданків, якщо вони суперечать умові BCSOS. Також бачимо, що в операторі  $T_{odd}^y$  введені потрібні больцманівські множники. Справді, енергія взаємодії між двома вузлами з висотами  $h_j$  і  $h'_j$  що відрізняється на одиницю рівна  $K_{2y}$ . Після того, як ми подіємо на певний стан  $|h_j\rangle$  оператором  $T_{odd}^y$  ми отримуємо суму, в яку входять усі дозволені стани з висотами, що відрізняються від висот  $|h_j\rangle$  на одиницю на всіх непарних вузлах, кожен доданок буде домножений на відповідний больцманівський множник. Проекційні оператори  $P$  залишать в сумі лише ті стани  $|h'_j\rangle$  висоти на непарних вузлах в яких не відрізняються від висот на парних вузлах  $|h_j\rangle$  на  $\frac{1}{2}$  (рис. 3, штрих-пунктирні лінії). Якщо після дії оператором  $T_{odd}^y$  ми подіємо  $T_{even}^y$  то отримуємо вже суму з усіма допустимими станами  $|h'_j\rangle$ , такими, що висоти відрізняються від  $|h_j\rangle$  на одиницю. Проекційні оператори в  $T_{even}^y$  відберуть тільки ті парні висоти в  $|h'_j\rangle$  які відрізняються від непарних в  $|h'_j\rangle$  на  $\frac{1}{2}$ . Таким чином проекційні оператори в  $T_{odd}^y$  і  $T_{even}^y$  забезпечують виконання BCSOS умови між станами  $|h_j\rangle$  та  $|h'_j\rangle$  і всередині рядку  $|h'_j\rangle$  відповідно (рис. 3, подвійні штрих-пунктирні лінії). Трансфер-матрицю остаточно запишемо як  $T = T^x T_{even}^y T_{odd}^y$

Для того, щоб виразити трансфер-матрицю через оператори спіну вважатимемо стани  $|h_j\rangle$ ,  $|h'_j\rangle$  векторами в спінорному просторі. Означимо  $s_j^z = h_{j+1} - h_j$ , тоді кожному стану  $|h_j\rangle$  ми можемо співставити стан  $|s_j^z\rangle$ . Діагональна частина трансфер-матриці (3.1) виражена через спінові оператори матиме вигляд  $T^x = \prod_j e^{-\beta K_{2x}(s_{j-1}^z + s_j^z)^2}$ . Порівнявши дію операторів (3.2), (3.3) з дією операторів  $s_j^z$ ,  $s_j^+$ ,  $s_j^-$  (див. табл. 1) отримуємо таке спінорне представлення  $P_{j-1,j} P_{j,j+1} e^{iU_j} = s_{j-1}^+ s_j^-$ . Приймаючи до уваги, що проек-

$ j-1, j, j+1\rangle$	$P_{j-1,j} P_{j,j+1} e^{iU_j}$	$P_{j-1,j} P_{j,j+1} e^{-iU_j}$	$ s_{j-1}^z s_j^z\rangle$	$s_{j-1}^+ s_j^-$	$s_{j-1}^- s_j^+$
$ 0, \frac{1}{2}, 1\rangle$	0	0	$ \uparrow\uparrow\rangle$	0	0
$ 0, \frac{1}{2}, 0\rangle$	0	$ 0, -\frac{1}{2}, 0\rangle$	$ \uparrow\downarrow\rangle$	0	$ \downarrow\uparrow\rangle$
$ 0, -\frac{1}{2}, 0\rangle$	$ 0, \frac{1}{2}, 0\rangle$	0	$ \downarrow\uparrow\rangle$	$ \uparrow\downarrow\rangle$	0
$ 0, -\frac{1}{2}, -1\rangle$	0	0	$ \downarrow\downarrow\rangle$	0	0

Табл. 1. Порівняння дії операторів  $P$ ,  $U$  в просторі висот  $h_j$  і дії спінових операторів  $s^\pm$ .

ційні оператори і оператори піднімання (опускання) висоти на різних вузлах комутують можемо записати повну трансфер-матрицю через

спінові оператори

$$T = \prod_j e^{-\beta K_{2x}(s_{j-1}^z + s_j^z)^2} \prod_{j=even} [1 + e^{-\beta K_{2y}}(s_{j-1}^+ s_j^- + s_{j-1}^- s_j^+)] \times \prod_{j=odd} [1 + e^{-\beta K_{2y}}(s_{j-1}^+ s_j^- + s_{j-1}^- s_j^+)]. \quad (3.5)$$

Для того, щоб знайти гамільтоніан квантової системи нам потрібно обчислити логарифм трансфер-матриці (3.5), що точно зробити неможливо через те, що добутки в позадіагональній частині трансфер-матриці не комутують.

#### 4. Наближення сильної анізотропії. Підхід одного перекиду

Оператор трансфер-матриці є оператором спінів в одному вимірі, отже гамільтоніан буде описувати спінову, квантову одновимірну систему. Однак, некомутативність множників в операторі  $T$  змушує нас застосовувати наближені підходи при обчисленні гамільтоніану квантового відповідника моделі поверхні. Припустимо, що взаємодія вздовж осі  $y$  в нашій моделі є достатньо сильною так, що  $\beta K_{2y} \gg 1$ . Це означає, що  $e^{-\beta K_{2y}}$  є малою величиною і ми можемо переписати вираз (3.5) у вигляді

$$T = \prod_j e^{-J_z(s_{j-1}^z + s_j^z + \frac{1}{4})} \prod_j e^{\frac{J}{2}(s_{j-1}^+ s_j^- + s_{j-1}^- s_j^+)} \quad (4.1)$$

де  $\frac{J}{2} = e^{-\beta K_{2y}}$ ,  $J_z = 2\beta K_{2x}$ . Якщо ми припустимо, що взаємодія вздовж осі  $x$  є слабкою  $2\beta K_{2x} \ll 1$ , то ми можемо знехтувати некомутативністю операторів в експоненті і переписати остаточно трансфер-матрицю в наближенні сильної анізотропії

$$T = e^{\sum_j -J_z(s_{j-1}^z + s_j^z + \frac{1}{4}) + \frac{J}{2}(s_{j-1}^+ s_j^- + s_{j-1}^- s_j^+)} \quad (4.2)$$

звідки з точністю до неважливих доданків отримуємо гамільтоніан квантової спінової моделі

$$H = \sum_j -J_z s_{j-1}^z s_j^z + \frac{J}{2}(s_{j-1}^+ s_j^- + s_{j-1}^- s_j^+), \quad (4.3)$$

що є гамільтоніаном спін- $\frac{1}{2}$   $XXZ$  моделі. Відомо [19], що  $XXZ$  ланцюжок при нульовій температурі зазнає фазового переходу в точці

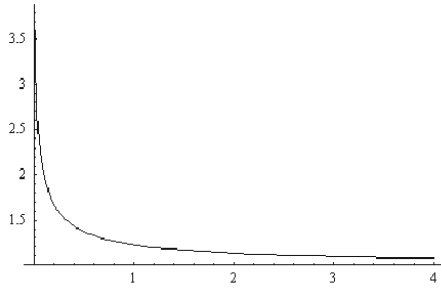


Рис. 4. Відношення критичної температури шосткування отриманої в наближенні сильної анізотропії до точного результату залежно від ступеня неоднорідності ґратки ( $K_{2y}/K_{2x}$ ) для BCSOS моделі.

$J_z = J$ . Звідси ми можемо знайти критичну температуру переходу від гладкої до шорсткої фази

$$\beta K_{2x} = e^{-\beta K_{2y}}. \quad (4.4)$$

Описаний метод трансфер-матриці може бути застосований до складніших SOS моделей. Для даної BCSOS моделі існує точний розв'язок (1.2), що дозволяє оцінити точність наближення сильної анізотропії (рис. 4). Якщо ми цікавимося лише температурою фазового переходу, то навіть для ізотропної ґратки ( $J_{2x} = J_{2y}$ ) наближення сильної анізотропії є прийнятним.

Розглянемо тепер підхід одного перекиду, який дозволяє суттєво спростити обчислення трансфер-матриці у наближенні сильної анізотропії. Повернемося до питання про вигляд позадіагональної частини трансфер-матриці  $T^y$ . Приймаючи до уваги, що  $\beta K_{2y} \gg 1$  будемо шукати такий оператор  $T^y$ , що  $T^y|h_j\rangle$  є сумою усіх станів, що відрізняються від  $|h_j\rangle$  висотою лише на одному вузлі

$$T^y|h_j\rangle = |h_j\rangle + e^{-\beta K_{2y}} \sum_k |h_j \pm \delta_{j,k}\rangle. \quad (4.5)$$

Усіма іншими доданками, ми можемо знехтувати, оскільки больцманівські множники будуть пропорційні квадратові  $e^{-\beta K_{2y}}$ . Шуканий оператор має вигляд  $T^y = 1 + e^{\frac{\beta}{2}} \sum_j P_{j-1,j} P_{j,j+1} (e^{iU_j} + e^{-iU_j})$ . В спіновому представленні, це відовідає сумі одиничного операторів і операторів перекиду спіну  $T^y = 1 + e^{\frac{\beta}{2}} \sum_j (s_{j-1}^- s_j^+ + s_{j-1}^+ s_j^-)$ . Маючи  $T^y$  і нехтуючи некомутативністю  $T^y$  та  $T^x$ , що відповідає наближенню  $\beta K_{2y} \gg 1, \beta K_{2x} \ll 1$ , знову отримуємо гамільтоніан (4.3).

Формально здійснити перехід від трансфер-матриці (3.5) до гамільтоніану (4.3) можна в границі низьких температур  $\beta \gg 1$ . Оскільки нам потрібно знайти температуру фазового переходу, яка співмірна з одиницею, ми мусимо приймати наближення сильної анізотропії. Для детально розглянутого тут випадку BCSOS моделі існує точний розв'язок, тому вкладені обчислення служать для перевірки прийнятності наближення сильної анізотропії і узгодження формулювання підходу одного перекиду з наближенням сильної анізотропії.

## 5. Взаємодія дальших ніж найближчі сусіди

Розглянемо BCSOS модель (1.1) з додатковою взаємодією вздовж осі  $x$   $K_{4x}$

$$H = \sum_{i,j} \left[ K_{2x} (h_{i,j} - h_{i+2,j})^2 + K_{2y} (h_{i,j} - h_{i,j+1})^2 \right] + \sum_{i,j} K_{4x} (h_{i,j} - h_{i+4,j})^2; \quad (5.1)$$

Приймаємо, що  $K_{4x}$  є додатнім, інакше поверхня (110) буде нестабільною.  $K_{2x}$  може мати як від'ємний так і додатній знак. Основний стан буде гладким при  $K_{2x} > 0$ . При  $K_{2x} < 0$  основний стан поверхні буде реконструйованим, коли висоти вздовж осі  $x$  будуть чергуватися з періодом 4:  $(0, 1, 2, 1, 0, \dots)$ . При  $K_{2x} < -8K_{4x}$  поверхня (110) стає нестабільною.

Додатковий множник в гамільтоніані (5.1) не приводить до суттєвих ускладнень при обчисленні трансфер-матриці. Оскільки взаємодія  $K_{4x}$  стосується лише одного рядка, в нашому поділі ґратки, то зміниться лише діагональна частина трансфер-матриці

$$T^x = \prod_j e^{-\beta K_{2x} (s_{j-1}^z - s_j^z)^2 + K_{4x} (s_{j-2}^z + s_{j-1}^z + s_j^z + s_{j+1}^z)^2}. \quad (5.2)$$

В наближенні сильної анізотропії гамільтоніан квантового відповідника буде мати вигляд

$$H = - \sum_j \frac{J}{2} (s_{j-1}^+ s_j^- + s_{j-1}^- s_j^+) + \sum_j \left( J_z s_{j-1}^z s_j^z + J_2 s_j^z s_{j+2}^z + \frac{J_2}{2} s_j^z s_{j+3}^z \right), \quad (5.3)$$

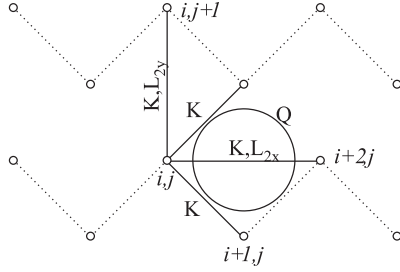


Рис. 5. RSOS модель з взаємодіями  $K$ ,  $K_{2x}$ ,  $L_{2x}$ ,  $K_{2y}$ ,  $L_{2y}$ ,  $Q$ . Поділ на рядки показаний пунктирною лінією.

де  $J = 2e^{-\beta K_{2y}}$ ,  $J_z = 2\beta K_{2x} + \frac{3}{2}\beta K_4$ ,  $J_2 = \beta K_4$ . Ми отримали одновимірну спінову модель з взаємодією дальших ніж найближчі сусіди. В описаному підході можна врахувати і інші взаємодії (рис. 1). Так, ми можемо ввести взаємодію вздовж рядка  $\sim (h_{i,j} - h_{i+3,j})^2$ , що приведе до перенормування коефіцієнтів при  $s_j^z s_{j+1}^z$ ,  $s_j^z s_{j+2}^z$  в гамільтоніані. Можна врахувати взаємодію  $\sim (h_{i+1,j} - h_{i,j\pm 2})^2$ , що в наближенні сильної анізотропії перенормує доданки  $s_j^z s_{j+1}^z$ .

## 6. RSOS модель

Моделі RSOS можуть використовуватися для опису поверхні (100) простого кубічного кристалу. В цих моделях різниця між висотами найближчих вузлів обмежена певним числом, в найпростішому випадку, який ми і будемо розглядати далі - одиницею. Найзагальніший гамільтоніан має вигляд [20]

$$H = \sum_{i,j} [K\delta(|h_{i,j} - h_{i+1,j}| - 1) + K\delta(|h_{i,j} - h_{i,j+(-1)^i}| - 1) + K_{2x}\delta(|h_{i,j} - h_{i+2,j}| - 1) + L_{2x}\delta(|h_{i,j} - h_{i+2,j}| - 2) + K_{2y}\delta(|h_{i,j} - h_{i,j+1}| - 1) + L_{2y}\delta(|h_{i,j} - h_{i,j+1}| - 2) + Q\delta(|h_{i-1,j} - h_{i+1,j}| - 1)\delta(|h_{i,j} - h_{i,j+1}| - 1)], \quad (6.1)$$

де  $\delta$  - символ Кронекера. Взаємодії зображені на рис. 5. Стан квантового гамільтоніану і трансфер-матрицю визначимо на зигзагоподівному рядку. Відразу можемо записати діагональну частину

трансфер-матриці

$$T^x = \prod_j e^{-\beta K\delta(|h_j - h_{j+1}| - 1) + K_{2x}\delta(|h_j - h_{j+2}| - 1) + L_{2x}\delta(|h_j - h_{j+2}| - 2)}, \quad (6.2)$$

де індекс рядка  $i$  опущений. Спінові стани  $s_j^z$  визначимо аналогічно як в BCSOS моделі, тому ми можемо записати (6.2) через спин-1 оператори

$$T^x = \prod_j e^{-\beta[(K+K_{2x})(s_j^z s_{j+1}^z)^2 + \frac{L_{2x}}{2}s_j^z s_{j+1}^z - (2K_{2x} - \frac{L_{2x}}{2})(s_j^z s_{j+1}^z)^2]}. \quad (6.3)$$

Для того, щоб знайти позадіагональну частину трансфер-матриці перейдемо до наближенням сильної анізотропії. В цьому випадку, нам потрібно знайти такий оператор, яким діючи на стан  $|h_j\rangle$  ми отримуємо суму усіх допустимих станів  $|h'_j\rangle$  що не відрізняються або відрізняються від  $|h_j\rangle$  висотою тільки на одному вузлі. Таким оператором буде

$$T^y = \prod_{j=even} T_j^y \times \prod_j e^{-\beta K\delta(|h_j - h_{j+1}| - 1)} \times \prod_{j=odd} T_j^y, \\ T_j^y = P(h_{j-1,j})P(h_{j,j+1}) \{1 + e^{-\beta L_{2y}}(e^{2iu_j} + e^{-2iu_j}) + e^{-\beta K_{2y}} [1 + (e^{-\beta Q} - 1)\delta(|h_{j-1} - h_{j+1}| - 1)] (e^{iu_j} + e^{-iu_j})\} \quad (6.4)$$

де оператори  $u$  і  $P$  аналогічні до (3.3) з тією різницею, що проєкційні оператори рівні одиниці у випадку  $|h_j - h_{j+1}| \leq 1$ . Множники з взаємодією  $K$  в експоненті враховують взаємодію між парними вузлами в  $|h_j\rangle$  і непарними в  $|h'_j\rangle$  чого у випадку BCSOS моделі не потрібно було робити, оскільки різниці найближчих висот в ній завжди  $\frac{1}{2}$ .

Нехтуючи некомутативністю операторів в показниках експоненти, що відповідає наближенню  $\beta K \ll 1$ ,  $\beta K_{2x} \ll 1$ ,  $\beta L_{2x} \ll 1$ ,  $\beta K_{2y} \gg 1$ ,  $\beta L_{2y} \gg 1$  отримуємо гамільтоніан одновимірної спінової системи  $H = \ln T^y T^x$

$$H = \sum_j \left\{ -\frac{J}{2}(s_j^+ s_{j+1}^- + s_j^- s_{j+1}^+) - \frac{J_L}{2}[(s_j^+ s_{j+1}^-)^2 + (s_j^- s_{j+1}^+)^2] - \frac{J_Q}{2}[s_j^z s_{j+1}^z (s_j^+ s_{j+1}^- + s_j^- s_{j+1}^+) + (s_j^+ s_{j+1}^- + s_j^- s_{j+1}^+) s_j^z s_{j+1}^z] + J_z s_j^z s_{j+1}^z + \Delta (s_j^z s_{j+1}^z)^2 + D s_j^z{}^2 \right\}, \quad (6.5)$$

де  $J = e^{-\beta(K_{2y}+Q)}$ ,  $J_L = 2e^{-\beta L_{2y}}$ ,  $J_Q = e^{\beta Q} - 1$ ,  $J_z = \frac{1}{2}L_{2x}$ ,  $\Delta = -2K_{2x} + \frac{1}{2}L_{2x}$ ,  $D = 2K + 2K_{2x}$ . Він відповідає одновимірній спин-1 моделі з взаємодіями найближчих сусідів.



Детельний аналіз фазової діаграми отриманої спінової моделі виходить поза межі цієї оглядової роботи і може бути знайдений у вже згадуваній праці ден Нійса і Ромелса [20]. Ми тут наголосимо на важливих деталях. В моделі, залежно від знаків взаємодій  $K$ ,  $L_1^x$ ,  $L_2^x$  можуть існувати три впорядковані фази, що відповідають гладким фазам поверхні (гладкій RSOS, BCSOS і реконструйованій BCSOS фазі). В системі існує також RSOS і BCSOS неупорядковані шорсткі фази, в яких на великих відстанях кореляційні функції  $G(r) = \langle (h_i - h_{i+r})^2 \rangle \sim \ln r$ . Існує також неупорядкована гладка фаза (DOF) в якій температурою зруйнований позиційний прядок сходинок поверхні догори-донижу, але залишається впорядкованою почерговість сходинок, що виражається відмінним від нуля параметром порядку  $\psi = \langle e^{i\pi h_i} (h_i - h_{i+1}) \rangle$ . Всі описані фази мають відповідники на спіновій мові. Гладкі фази відповідають феро- або антиферомагнітним основним станам спін-1 ланцюжка. Шорсткі фази - магнітно неупорядкованому основному станові і неупорядкована гладка фаза - станові валентних зв'язків (VBS). Детальніше природа неупорядкованої гладкої фази буде обговорена на прикладі BCSOS моделі.

## 7. Обговорення фазової діаграми BCSOS моделі, реконструйована і DOF фази

Повернемося до розгляду BCSOS моделі з взаємодією  $K_{4x}$  (5.1). Деталі побудови фазової спінової діаграми основного стану можна знайти в роботі [21]. Тут ми розглянемо лише якісну поведінку поверхні при зміні температури (рис. 6). Основний стан поверхні, залежно від знаку  $K_{2x}$  є гладким [1x1] або гладким реконструйованим [1x2]. При збільшенні температури відбувається перехід до шорсткої фази, можливо, з переходом через посередню DOF фазу. В деяких випадках, основний стан відомий точно, і характеристики поверхні можуть бути знайдені детально. Ці точки - це класичні стани Ніеля, що відповідають нулю температури (або  $K_{2y} \rightarrow \infty$ ); стан ідеально димеризованого стану, що відповідає ланцюжковій Маджумдара-Гоша [19] (ця точка відсутня на рис. 6, оскільки в нашій моделі є взаємодії  $s_j^z s_{j+3}^z$ ); і стан що відповідає XY ланцюжковій ( $K_{2x} = 0, K_{4x} = 0$  або  $T \rightarrow \infty$ ). В перерахованих випадках відомий точний вигляд кореляційних функцій спінової системи.

Кореляційну функцію висота-висота, можна представити через

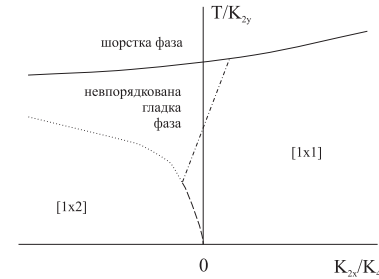


Рис. 6. Якісна фазова діаграма для BCSOS моделі. По осях відкладена анізотропія і температура. Суцільна крива відповідає переходу Костерліца-Таулеса, штрихована - фазовим переходам першого роду між двома гладкими фазами, крапкована - Ізинговій критичній поведінці. Штрих-пунктирна лінія відображає криву фазових переходів другого роду з постійно змінними критичними показниками.

двоспінові кореляційні функції

$$G(n) = \langle (h_0 - h_n)^2 \rangle = \sum_{j,k=1}^n \langle s_j^z s_k^z \rangle_0, \quad (7.1)$$

за умови трансляційної інваріантності спінових кореляційних функцій отримаємо

$$G(n) = n \frac{1}{4} + 2 \sum_{j=1}^n (n-j) \langle s_0^z s_j^z \rangle_0. \quad (7.2)$$

Загалом, нам невідомі точні вирази для спінових кореляційних функцій, але для визначення асимптотичної поведінки  $\lim_{n \rightarrow \infty} G(n)$  нам потрібно знати лише асимптотичну поведінку кореляційних функцій  $\langle s_0^z s_j^z \rangle_0$ . Крім того, усі доданки пропорційні  $n$  фазам де сумарне намагнічення рівне нулю (а саме такими є всі фази які нас цікавлять) при обчисленні  $G(n)$  при великих  $n$  прямують до сталої. Остаточний вираз для асимптотичної поведінки кореляційної функції при великих  $n$  буде мати вигляд

$$G(n) \sim - \sum_{j=1}^n j \langle s_0^z s_j^z \rangle_0 \quad (7.3)$$

Параметром порядку спінової моделі в фазі [1x1] є 'шахоподібне намагнічення'  $P_1 = \left( \frac{1}{N} \sum_j (-1)^j \langle s_j^z \rangle_0 \right)^2$ , а в фазі [1x2] компонента

димерного оператора  $P_2 = (\frac{1}{N} \sum_j (-1)^j \langle s_j^z s_{j+1}^z \rangle_0)^2$ . Обидва стани мають далекий порядок - двоспінові кореляційні функції експоненційно спадають на великих відстанях до певного скінченного значення. З (7.3) видно, що в гладких фазах  $G(n) < const$ . В ідеально впорядкованих станах [1x1] і [1x2] спінові кореляційні функції відомі і ми можемо знайти  $G(n)$  точно -  $G(n) = \frac{1}{8}(1 - (-1)^n)$  для фази [1x1] та  $G(4n) = 0, G(4n + 1, 3) = \frac{1}{4}, G(4n + 2) = 1$  для фази [1x2].

В фазі спінової рідини відсутнє впорядкування, а спінові кореляційні функції мають вигляд [22]  $\langle s_0^z s_j^z \rangle_0 = -\frac{1}{4\pi^2 \eta j^2} + (1)^j \frac{A}{j^{1/\eta}} + \dots$ , що дозволяє за допомогою (7.3) знайти асимптотику кореляційної функції  $G(n) \sim \ln(n)$ . У випадку XX ланцюжка, кореляційні функції відомі точно -  $\langle s_0^z s_{2j+1}^z \rangle_0 = -\frac{1}{\pi^2(2j+1)^2}, \langle s_0^z s_{2j}^z \rangle_0 = 0$ , звідки  $G(2n) = \frac{\gamma + 2 \ln 2 + \Gamma(n) + n \frac{\Gamma'(n)}{\Gamma(n)}}{\pi^2}$ , де  $\gamma$  - стала Ейлера,  $\Gamma$  - гамма-функція.

Невпорядкована гладка фаза відповідає димеризованій фазі - кореляційні функції спадають до нуля експоненційно, але далекий порядок існує, і виражається у відмінності від нуля  $z$  компоненти димеризаційного оператора. Експоненційне спадання кореляційної функції дозволяє знайти асимптотику кореляційних функцій  $G(n) < const$ , а у випадку ідеальної димеризації ми можемо знайти точний вираз для  $G(n)$

$$\langle s_j^z s_k^z \rangle_0 = \frac{1}{4} \delta_{j,k} - \frac{1}{8} [\delta_{j,k+1} + \delta_{j,k-1} - (-1)^j (\delta_{j,k-1} - \delta_{j,k+1})]$$

$$G(n) = \frac{1}{8} (1 - (-1)^n)$$

Слід зауважити, що нієлівські стани [1x1] і [1x2] є дво- і чотирикратно виродженими, а димеризований стан двократно виродженим. Ми обмежились розглядом тільки одного з вироджених станів, оскільки інші тривіально отримуються просторовою трансляцією.

Параметри порядку для спінових систем, потрібно пов'язати з певними величинами означеними на мові поверхні. Основною проблемою, є те, що при отриманні спінової моделі ми припустили просторову неоднорідність, і будь-яка величина, що визначена на спінових операторах буде враховувати існування чи відсутність впорядкування лише в одному напрямі. Розглянемо детальніше ідеальний димеризований стан.

$$|\Psi\rangle = |12\rangle|34\rangle\dots|N-1N\rangle, \quad (7.4)$$

де  $|ij\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$ . Якщо ми розпишемо добуток синглетів (7.4), то отримаємо  $2^{\frac{N}{2}}$  доданків, кожен з яких буде мати вигляд

такого типу

$$(\uparrow\downarrow)(\uparrow\downarrow)(\downarrow\uparrow)(\downarrow\uparrow)(\downarrow\uparrow)(\uparrow\downarrow)\dots \quad (7.5)$$

Видно, що в конфігурації зустрічаються два спіни орієнтовані вниз, що відповідає на поверхні сходинці вниз. Далі ми маємо антиферомагнітно впорядкований відрізок, і два спіни орієнтовані вверх, що відповідає сходинці вверх. Оскільки кожен з доданків типу (7.5) складається з добуток синглетів на сусідніх вузлах, то це означає, що завжди після двох сусідніх спінів орієнтованих вниз (сходинки вниз) ми будемо мати два спіни орієнтовані вверх (сходинку вверх) і навпаки. Отже, поверхня залишається гладкою, але в цій фазі втрачений порядок сходинок в площині.

Розглянемо оператор  $Step_j = 2(s_{j-1}^z s_j^z + \frac{1}{4})$  [23], який відмінний від нуля тоді, коли на вузлах  $(j-1, j)$  спіни орієнтовані як  $\uparrow\uparrow$  або  $\downarrow\downarrow$ , на мові поверхні, це означає, що на вузлі  $j$  є сходинка догори або донизу. Кореляційна функція сходинка-сходинка в димеризованому стані (7.4) рівна

$$\langle \Psi | Step_j Step_{j+n} | \Psi \rangle = \begin{cases} \frac{1}{2} & \text{якщо } n = 0 \\ \frac{1}{4} & \text{якщо } n \geq 2 \text{ і парне,} \\ 0 & \text{інакше} \end{cases} \quad (7.6)$$

що означає, що відстань між сходинками є завжди парна. В роботі [23] методом точної діагоналізації порахована кореляційна функція сходинка-сходинка для системи, що перебуває в DOF фазі, але не допускає точного розв'язку. Показано, що  $\langle \Psi | Step_j Step_{j+n} | \Psi \rangle$  на великих відстанях спадає до нуля, але має осциляційний характер з періодом  $\pi$  - сходинки воліють розміщуватися одна відносно одній на парній віддалі.

Між сходинками ми маємо відрізки нієлівського впорядкування. Якщо ми поділимо ґратку на якій визначена на дві підґратки (з парними і непарними вузлами), то відрізки з максимумами, що відповідають одній з них будуть зустрічатися частіше. Іншими словами вузли однієї з підґраток переважають серед локальних максимумів. Це спостереження підказує, як побудувати параметр порядку на поверхні який би виокремив DOF фазу.

$$P_{DOF} = \langle \frac{1}{N} \sum_r e^{iGr} O_r \rangle,$$

$$O_r = \frac{1}{16} \prod_{i=1}^4 [\Delta h_{r,i} + 1] \quad (7.7)$$

де  $G$  - вектор оберненої ґратки. Оператор  $O_r$  відмінний від нуля тільки тоді, коли на вузлі  $r$  маємо локальний максимум поверхні. Якщо  $P_{DOF}$  відмінне від нуля, то це вказує на переважання вузлів певної підґратки на верхньому шарі поверхні (рис. 1). В роботі [23], [24] обчислення методом Монте-Карло підтверджують, що в DOF фазі  $P_{DOF}$  відмінне від нуля. Властивості всіх фаз підсумовані в таблиці 2.

	гладка [1x1]	гладка [1x2]	шорстка	DOF
виродження	2	4	1	2
щілина	$\neq 0$	$\neq 0$	0	$\neq 0$
$\lim_{n \rightarrow \infty} G(n)$	const	const	$\ln r$	const
$P_1$	$\neq 0$	0	0	0
$P_2$	0	$\neq 0$	0	0
$P_{DOF}$	$\neq 0$	$\neq 0$	$\neq 0$	0

Табл. 2. Характеристики фаз що представлені на фазовій діаграмі (рис. 6) для BCSOS моделі (5.1).

## 8. Висновки

Кристалічні поверхні виявляють багату поведінку і становлять інтерес з огляду на широке промислове зацікавлення. Експериментально підтверджено існування всіх описаних в цьому розділі сценаріїв - реконструкції, прерафенінгу і шорсткування, хоча експериментальне дослідження двох останніх переходів стикається з труднощами з огляду на безмежний порядок шорсткування і неуніверсальність прерафенінгу. З другого боку саме ці два типи фазових переходів підтримують постійний академічний інтерес до дискретних моделей поверхні.

Аналогія SOS моделей з квантовими спіновими одновимірними системами дозволяє використати результати теорії низьковимірного магнетизму у вивченні поверхневих фазових переходів. Саме ця аналогія дозволяє описати неупорядковану гладку фазу, побудувати для неї параметр порядку і з'ясувати різну роль далеких взаємодій у утворенні неупорядкованої гладкої фази у BCSOS і RSOS моделях.

В межах описаного підходу є можливість суттєво розширити клас вивчених явищ на поверхні. Можна врахувати структурну неоднорідність поверхні, що приведе до неоднорідності  $zz$  взаємодій у спіновій моделі. Такі неоднорідності виявлено в металах Wo, Mo [25]

і напівпровідниках. Іншим перспективним напрямком є врахування фононних ступенів вільностей поверхні.

## Література

1. C. Hofner, J.W. Rabalais: Deconstruction of the Au110-(1x2) surface. Phys. Rev. B 1998; 58: 9990.
2. I. Vilfan, J. Villain: Phase transition on reconstructed (110) surfaces. Surf. Sci. 1991; 257: 368.
3. L. Barbier, B. Salanon and J. Sposser: Structure and ordering dynamics for Au deposition on Au(110) (1x2). J. Vac. Sci. Technol. A 1995; 13(1): 117.
4. M.A. Krzyzowski et al: Thermal disordering of the Pt(110)-(1x2) surface. Phys. Rev. B 1994; 50:18505.
5. H.N. Yang, T.M. Lu, G.C.Wang: High-resolution low-energy electron-diffraction analysis of the Pb(110) roughening transition. Phys. Rev. B 1991; 43: 4714.
6. Y. Cao, E.H. Conrad: Approach to thermal roughening of Ni(110): A study by high-resolution low-energy electron diffraction. Phys. Rev. Lett. 1990; 64: 447.
7. G.A. Held, J.L. Jordan-Sweet, P.M. Horn, A.Mak, R.J. Birgeneau: X-ray scattering study of the thermal roughening of Ag(110). Phys. Rev. Lett. 1987; 59: 2075.
8. P. Zeppenfeld, K. Kern, R. David, G. Comsa: No thermal roughening on Cu(110) up to 900 K. Phys. Rev. Lett. 1989; 62: 63.
9. P. Day, M. LaMadrid, M. Lysek, D. Goodstein: Multilayer krypton phase diagram. Phys. Rev. B 1993; 47: 7501.
10. H.S. Youn, X. F. Meng, and G. B. Hess: Multilayer adsorption of xenon, krypton, and argon on graphite: An ellipsometric study. Phys. Rev. B 1993; 48: 14556.
11. D. Davidson; M. den Nijs: Roughening-induced deconstruction in (100) facets of CsCl-type crystals. Phys. Rev. E 1997; 55: 1331.
12. S.B. Zhang, A. Zunger: Method of linear combination of structural motifs for surface and step energy calculations: Application to GaAs(001). Phys. Rev. B 1996; 53: 1343.
13. V.P. LaBella, D.W. Bullock, M. Anser, Z. Ding, C. Emery, L. Bellaiche, P.M. Thibado: Atomic-Scale Observation of Temperature and Pressure Driven Preroughening and Roughening. Phys. Rev. Lett. 2003; 90: 216109.
14. S.T.Chui, J.D.Weeks: Phase transition in the two-dimensional

- Coulumb gas, and the interfacial roughening transition. *Phys. Rev. B* 1976; 14: 4978.
15. H. van Beijeren: Exactly solvable model for the roughening transition of a crystal surface. *Phys. Rev. Lett.* 1977; 38: 993.
  16. V. P. Zhdanov, B. Kasemo: Surface roughening: Kinetic, adsorbate-induced effects, and manifestation in catalytic reactions. *J. Chem. Phys.* 1998; 108: 4582;
  17. Р. Бэкстер. Точно решаемые модели в статистической механике. М.: Мир, 1985.
  18. J. B. Kogut: An introduction to lattice gauge theory and spin systems. *Rev. Mod. Phys.* 1979; 51: 659.
  19. A. Auerbach, *Interacting Electrons and Quantum Magnetism*, Springer-Verlag, N.Y. 1994.
  20. M. den Nijs, K. Rommelse: Preroughening transitions in crystal surfaces and valence-bond phases in quantum spin chains. *Phys. Rev. B* 1989; 40:4709.
  21. G. Santoro, M. Fabrizio: Disordered flat phase in a solid-on-solid model of fcc(110) surfaces and dimer states in quantum spin-1/2 chains. *Phys. Rev. B* 1994; 49: 13886.
  22. T. Hikihara, A. Furusaki: Correlation amplitude for the  $S=\frac{1}{2}$  XXZ spin chain in the critical region: Numerical renormalization-group study of an open chain. *Phys. Rev. B* 1998; 58:R583.
  23. G. Santoro et al: Disordered flat phase and phase diagram for restricted solid-on-solid models of fcc (110) surfaces. *Phys. Rev. B* 1996; 53:13169.
  24. S. Prestipino, E. Tosatti: Preroughening, fractional-layer occupancies, and phase separation at a disordered flat metal surface. *Phys. Rev. B* 1998; 57: 10157.
  25. T.E. Felter, R.A. Barker, P.J. Estrup: Phase Transition on Mo(100) and W(100) Surfaces. *Phys. Rev. Lett.* 1977; 38: 1138.



Препринти Інституту фізики конденсованих систем НАН України розповсюджуються серед наукових та інформаційних установ. Вони також доступні по електронній комп'ютерній мережі на WWW-сервері інституту за адресою <http://www.icmp.lviv.ua/>

The preprints of the Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine are distributed to scientific and informational institutions. They also are available by computer network from Institute's WWW server (<http://www.icmp.lviv.ua/>)

Олесь Володимирович Забуранний

ДИСКРЕТНІ МОДЕЛІ ОПИСУ ПОВЕРХНІ І ЇХНІ КВАНТОВІ СПІНОВІ  
ВІДПОВІДНИКИ

Роботу отримано 29 грудня 2005 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку семінаром відділу квантово-статистичної теорії процесів каталізу

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені