ЖУРНАЛ ФІЗИЧНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ
т. 10, № 2 (2006) с. 98–107

JOURNAL OF PHYSICAL STUDIES
v. 10, No. 2 (2006) p. 98–107

ДИСКРЕТНІ МОДЕЛІ ПОВЕРХНІ ТА ЇХНІ КВАНТОВІ СПІНОВІ ВІДПОВІДНИКИ

О. Забуранний
Інститут фізики конденсованих систем НАН України
вул. Свєнціцького, 1, 79011, м. Львів, Україна
(Отримано 21 червня 2006 р.)

Огляд присвячено дискретним моделям поверхні та їхнім квантовим спіновим відповідникам. Розглянуто температурні переходи між гладкими, шорсткими, реконструйованими та невпорядкованою гладкою фазами. Основний аспект роботи — застосування методу трансфер-матриці для дослідження температурної поведінки ґраткових дискретних SOS(solid on solid — тверде тіло на твердому тілі)-моделей. Показано, як за допомогою цього методу зіставити параметри порядку для поверхневих фаз і фаз квантових спінових систем при нульовій температурі; установлено залежність між асимптотичною поведінкою кореляційних функцій висота-висота та спінових кореляційних функцій.

Ключові слова: модель SOS, метод трансфер-матриці, спінові ланцюжки, перехід Костерліца–Таулеса.

PACS number(s): 64.70.Kb, 68.35.Rh

I. ВСТУП

Кристалічні поверхні демонструють багату на фазові переходи поведінку. З температурою, тиском чи введенням неоднорідности при незмінному об'ємному впорядкуванні поверхня може змінювати свою симетрію. У статті оглянуто властивості гладкої (flat), шорсткої (rough), невпорядкованої гладкої (disordered rough, DOF) і реконструйованої (reconstructed) фаз кристалічних поверхонь.

Найповніше фазові переходи на поверхні вивчено в металах. Експериментально встановлено, що у важких шляхетних металах (наприклад, Au [1–3]; Pt [4]) існує низькотемпературна реконструйована фаза $[1 \times 2]$ з подвоєним періодом ґратки на площині в напрямку (001), гладка фаза й шорстка фаза, тоді як у деяких напів шляхетних і легких шляхетних металах (Cu, Ag, Ni, Pd) існує лише перехід від гладкої до шорсткої фази [5–8]. Фазові переходи реконструкції відбуваються також на поверхні тонких плівок інертних газів (Ar, Kr, Xe) на графітній підкладці [9, 10]. Реконструкція й шорсткування присутні в поведінці площин (100) кристалів типу CsCl [11], але тут подвоюється період ґратки при реконструкції в обох напрямках поверхні. Реконструйована фаза має симетрію $[2 \times 2]$. Ще складніші структури утворюються на (110) поверхнях напівпровідників типу III–V [12, 13].

Для опису перерахованих сполук добре підходять дискретні моделі "тверде тіло на твердому тілі" [14]. SOS-моделі є класичними, у яких поверхня описується набором дискретних висот $h_{i,j}$, означених на двовимірній ґратці. Взаємодія вводиться так, щоб стабілізувати гладку поверхню — вона збільшується з різницею висот, які відповідають двом вузлам. Загальною рисою моделей SOS є те, що при низьких температурах поверхня залишається гладкою, з підвищенням температури з'являються термодинамічні відхилення — тераси й западини. При малих температурах форма терас є простою, оскільки складність форми збільшує їхню енерґію, але з підвищенням температури, коли відхилення починають взаємодіяти, їхня форма ускладнюється. Урешті, при певній критичній температурі T_c відбувається фазовий перехід шорсткування.

Предметом нашого зацікавлення є сполуки й моделі, які допускають утворення гладкої та реконструйованої фаз при низькій температурі. Саме в таких випадках з підвищенням температури може появитися невпорядкована гладка фаза. Невпорядкована гладка фаза, яка є проміжною між низькотемпературною гладкою й високотемпературною шорсткою, відділена від гладкої лінією фазових переходів із постійно змінними критичними показниками, а від шорсткої — лінією фазових переходів Костерліца–Таулеса. У статті показано, що описаний сценарій відповідає переходові від антиферомагнетного, через стан валентних зв'язків, до невпорядкованого парамагнетного стану. Неуніверсальний перехід від гладкої до невпорядкованої гладкої фази називають передшорсткуванням (preroughening), а до шорсткої фази — шорсткуванням (roughening).

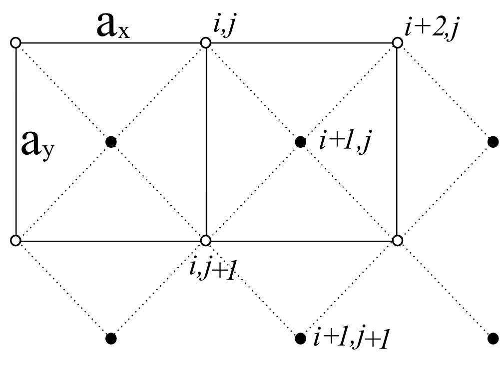

Рис. 1. Поверхня (110) об'ємоцентрованої ґратки. Світлі й темні атоми належать до двох підґраток, які зсунуті одна щодо одної на півперіоду

Найпростішою серед моделей типу SOS є BCSOS(body-centered SOS)-модель (рис. 1), у якій різниця між висотами на сусідніх вузлах може мати значення $\pm\frac{1}{2}$. Цю модель можна використати для вивчення шорсткування (100) поверхні об'ємоцентрованої ґратки чи (110) поверхні гранецентрованої ґратки. Взаємодію можна ввести між найближчими чи дальшими, ніж найближчі, сусідами. Гамільтоніян для BCSOS-моделі із взаємодією найближчих сусідів (K_{2x}, K_{2y})

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

допускає точний розв'язок. У 1977 році ван Бейєрен [15] вказав на еквівалентність BCSOS-моделі шестивершинній моделі, що дає змогу знайти температуру шорсткування

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

(у шестивершинній моделі — це температура фазового переходу між антисеґнетоелектричною й невпорядкованими фазами [17]). Перехід між гладкою та шорсткою фазами є переходом типу Костерліца–Таулеса. Реалізація саме такого переходу додатково посилює зацікавлення фазовими переходами на поверхні, оскільки перехід Костерліца–Таулеса є дуже м'яким фазовим переходом — вільна енерґія f і всі її похідні не мають синґулярностей при $T = T_c$ ($f \sim e^{-\alpha/\sqrt{T-T_c}}$) [17]. Хоча точний розв'язок допускає лише BCSOS-модель, інші моделі (RSOS (restricted SOS) — де різниця висот — $0, \pm 1$, DGSOS (discrete gaussian) — де взаємодія пропорційна квадратові різниці висот [14]) також указують на те, що перехід від гладкої до шорсткої фази є переходом безмежного порядку Костерліца–Таулеса. Крім описаного тут (найпростішого) сценарію, SOS-моделі можуть включати далекосяжні взаємодії, описувати взаємовплив адсорбції чи реконструкції та шорсткування [16].

Новим поштовхом у вивченні температурних фазових переходів на поверхні кристалів було зіставлення RSOS-моделей з квантовими спіновими одновимірними системами. Основною ідеєю є добре відома [18] еквівалентність між класичною термодинамічною задачею в D-вимірах і пошуком основного стану для відповідного гамільтоніяна в $(D-1)$-вимірі. У 1989 році ден Нійс і Ромелс [20] представили роботу, де встановлено відповідність між RSOS-моделлю (придатною для опису поверхні (100) простої кубічної ґратки) і квантовим спіновим ланцюжком зі спіном 1. Показано, що опис термодинаміки SOS-моделі з обмеженням різниці висот між сусідніми вузлами, яка не перевищує S — відповідає пошукові основного стану для спін-S квантового ланцюжка. Іншим значним аспектом праці [20] є те, що в ній передбачено виникнення невпорядкованої гладкої фази (DOF) і важливість взаємодії між дальшими, ніж найближчі, вузлами в утворенні реконструйованої та невпорядкованої гладкої фаз.

Далі докладніше розглянуто ідею праці [20], застосованої до BCSOS-моделі.

II. МЕТОД ТРАНСФЕР-МАТРИЦІ

У цьому розділі коротко нагадуємо 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 гамільтоніян можна розбити на дві частини, які описують взаємодію між вузлами в горизонтальному й вертикальному напрямках (рис. 2). Взаємодії вздовж рядків входять у доданки H^x, кожен з яких залежить від значень змінних σ на рядку n: $H^x(\sigma_{n,1}, \sigma_{n,2}, \ldots \sigma_{n,M}) \equiv H^x(\{\sigma_n\})$. Взаємодії між двома сусідніми рядками входять у доданки $H^y(\{\sigma_n\}, \{\sigma_{n+1}\})$, які залежать від значень σ на двох сусідніх рядках n та $n+1$. Отже,

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

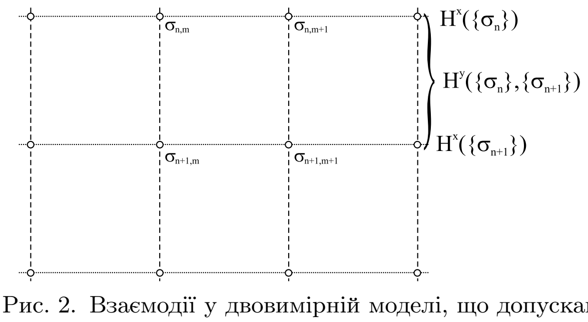

Рис. 2. Взаємодії у двовимірній моделі, що допускають застосування методу трансфер-матриці.

Статистичну суму, відповідно, запишемо так:

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

згрупуємо сумування за конфіґураціями за рядками

$$Z = \sum_{\{\sigma_1\}} \sum_{\{\sigma_2\}} \cdots \sum_{\{\sigma_N\}} T^{\{\sigma_1\}}_{\{\sigma_2\}} T^{\{\sigma_2\}}_{\{\sigma_3\}} \ldots T^{\{\sigma_N\}}_{\{\sigma_{N+1}\}}, \tag{2.3}$$

де $T \equiv T^{\{\sigma_n\}}_{\{\sigma_{n+1}\}} = \mathrm{e}^{-\beta [H^x(\{\sigma_n\}) + H^y(\{\sigma_n\}, \{\sigma_{n+1}\})]}$.

Величина T залежить від $2M$ змінних $\sigma_{n,m}$, означених на двох сусідніх рядках — усього $(p^M \times p^M)$ можливих значень. Якщо розглядати T як матрицю і покласти періодичні граничні умови $\{\sigma_{N+1}\} = \{\sigma_1\}$, то кожне сумування за спільними індексами в (2.3) є перемножуванням матриць, а останнє, за конфіґураціями $\{\sigma_1\}$ — узяттям сліду, тому

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

де $T^x = \mathrm{e}^{-\beta H^x(\{\sigma_n\})}$ — діягональна частина трансфер-матриці, яка залежить від енергії конфіґурації на рядку n, $T^y = \mathrm{e}^{-\beta H^y(\{\sigma_n\},\{\sigma_{n+1}\})}$ — позадіягональна частина, що залежить від енергії взаємодії між рядками при різних конфіґураціях. В обчисленні трансфер-матриці ключовими моментами є визначення T^y. Слід зауважити, що матриці T^x та T^y не комутують.

Суть зведення класичної моделі у двох вимірах до квантової в одному полягає у знаходженні оператора трансфер-матриці $\hat{T}$, матричне представлення якого в певному просторі дорівнюватимуть T. Матриця T залежить від конфіґурації двох сусідніх рядків. Кожній з можливих p^M-конфіґурацій $\{\sigma\}$ зіставляємо вектор простору $|i\rangle$, на якому буде означений оператор $\hat{T}$. Матричний елемент $\hat{T}_{i,j}$ повинен дорівнювати матричному елементові T при конфіґураціях сусідніх рядків, що відповідають станам $|i\rangle$ та $|j\rangle$.

Вільна енерґія на один рядок у термодинамічній межі $N \to \infty$ має вигляд

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

де Λ_j — власні значення матриці T, а $\Lambda_{\max}(\beta)$ — найбільше з них, яке залежить від температури. Якщо ввести гамільтоніян, який дорівнює логарифмові трансфер-матриці класичної моделі,

$$\hat{H} = -\ln \hat{T}, \tag{2.6}$$

то вільна енерґія (2.5) буде енерґією основного стану (2.6) $f = -\frac{1}{\beta} E_{\mathrm{GS}}$. Отже, щоб вивчити поведінку в класичній моделі, потрібно дослідити поведінку при нульовій температурі квантової моделі (2.6).

III. ТРАНСФЕР-МАТРИЦЯ ДЛЯ BCSOS-МОДЕЛІ

Для SOS-моделей шукаємо гамільтоніян у спінорному просторі. Це буде гамільтоніян одновимірної спінової системи. Величина спіну залежатиме від обмеження, яке накладається на різницю висот між сусідніми висотами SOS-моделі. У цьому розділі розглянуто BCSOS-модель, а далі показано, як метод діє для інших SOS-моделей.

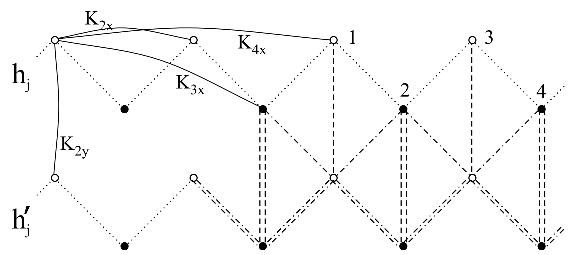

Рис. 3. BCSOS-модель із взаємодіями K_{2x}, K_{3x}, K_{4x}, K_{2y}. Поділ на рядки показано пунктирною лінією. Штрих-пунктирній, штрихованій і подвійній штрихованій лініям відповідають дії операторів T^x, T^y_{odd} і T^y_{even} відповідно.

Поділімо поверхню на рядки так, як показано на рис. 3 (штрихована лінія). Це найзручніший, але не єдиний можливий поділ на рядки для обчислення трансфер-матриці. Трансфер-матриця залежатиме від конфіґурацій двох сусідніх рядків $\{h\}$ і $\{h'\}$, де $\{h\}$ — набір значень $h_1 \dots h_M$. Зіставимо z-компоненті спіну різницю висот $s_j^z = h_{j+1} - h_j$. Тоді діягональну частину T^x записуємо лише через різниці висот в одному, нештрихованому рядку $\{h\}$

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

Для того, щоб знайти позадіягональну компоненту T^y, потрібно знайти такий оператор, який, діючи на нештрихований рядок, дасть суму всіх дозволених конфіґурацій штрихованого рядка з потрібними больцманівськими множниками. Очевидно, що отримати допустимі конфіґурації $\{h'\}$ можна, підіймаючи чи опускаючи певні висоти в $\{h\}$ на одиницю, але пильнуючи, щоб не порушувалися умови BCSOS — різниці сусідніх висот не можуть перевищувати $\frac{1}{2}$.

Уведімо оператор піднімання й опускання висоти на вузлі j,

$$\mathrm{e}^{\pm iU_j} |h\rangle = \mathrm{e}^{\pm iU_j} |\dots h_j \dots\rangle = |\dots h_j \pm 1 \dots\rangle, \tag{3.2}$$

і проєкційний оператор, який забезпечує виконання BCSOS-умови

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

Розгляньмо дію оператора

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

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

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

Для того, щоб виразити трансфер-матрицю через оператори спіну, означимо $s^z_j = h_{j+1} - h_j$. Діягональна частина трансфер-матриці (3.1), виражена через спінові оператори, матиме вигляд $T^x = \prod_j {\rm e}^{-\beta K_{2x}(s^z_{j-1}+s^z_j)^2}$. Порівнявши дію операторів (3.2), (3.3) з дією операторів s^z_j, s^+_j, s^-_j (див. таблицю 1), отримаємо таке спінорне представлення:

$$P_{j-1,j} P_{j,j+1} {\rm e}^{iU_j} = s^+_{j-1} s^-_j\,.$$

$\|j-1,j,j+1\rangle$	$P_{j-1,j}P_{j,j+1}{\rm e}^{iU_j}$	$P_{j-1,j}P_{j,j+1}{\rm e}^{-iU_j}$	$\|s^z_{j-1}s^z_j\rangle$	$s^+_{j-1}s^-_j$	$s^-_{j-1}s^+_j$
$\|0,\frac{1}{2},1\rangle$	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

Таблиця 1. Порівняння дії операторів P, U в просторі висот $|h\rangle$ і дії спінових операторів $s^{\pm}$.

Беручи до уваги, що проєкційні оператори й оператори піднімання (опускання) висоти на різних вузлах комутують, повну трансфер-матрицю записуємо через спінові оператори

$$T = \prod_j {\rm e}^{-\beta K_{2x}(s^z_{j-1}+s^z_j)^2} \prod_{j={\rm even}} \left[1 + {\rm e}^{-\beta K_{2y}}(s^+_{j-1}s^-_j + s^-_{j-1}s^+_j)\right] \prod_{j={\rm odd}} \left[1 + {\rm e}^{-\beta K_{2y}}(s^+_{j-1}s^-_j + s^-_{j-1}s^+_j)\right]. \tag{3.5}$$

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

IV. НАБЛИЖЕННЯ СИЛЬНОЇ АНІЗОТРОПІЇ. ПІДХІД ОДНОГО ПЕРЕКИДУ

Оператор трансфер-матриці є оператором спінів в одному вимірі, отже гамільтоніян описуватиме спінову, квантову одновимірну систему. Однак некомутативність множників в операторі T змушує нас застосовувати наближені підходи, обчислюючи гамільтоніян квантового відповідника моделі поверхні. Припустімо, що взаємодія вздовж осі в нашій моделі достатньо сильна, так, що $\beta K_{2y} \gg 1$, Це означає, що ${\rm e}^{-\beta K_{2y}}$ є малою величиною і вираз (3.5) переписуємо у вигляді

$$T = \prod_j {\rm e}^{-J_z(s^z_{j-1}s^z_j + \frac{1}{4})} \prod_j {\rm e}^{\frac{J}{2}(s^+_{j-1}s^-_j + s^-_{j-1}s^+_j)}, \tag{4.1}$$

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

$$T = {\rm e}^{\sum_j -J_z(s^z_{j-1}s^z_j + \frac{1}{4}) + \frac{J}{2}(s^+_{j-1}s^-_j + s^-_{j-1}s^+_j)}, \tag{4.2}$$

звідки з точністю до неважливих доданків отримуємо гамільтоніян квантової спінової моделі

$$H=\sum_j -J_z s^z_{j-1}s^z_j+\frac{J}{2}(s^+_{j-1}s^-_j+s^-_{j-1}s^+_j), \tag{4.3}$$

що є гамільтоніяном спін-$\frac{1}{2}$ XXZ моделі. Відомо [19], що XXZ-ланцюжок при нульовій температурі зазнає фазового переходу в точці $J_z = J$. Звідси можна знайти критичну температуру переходу від гладкої до шорсткої фази

$$\beta K_{2x} = \mathrm{e}^{-\beta K_{2y}}. \tag{4.4}$$

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

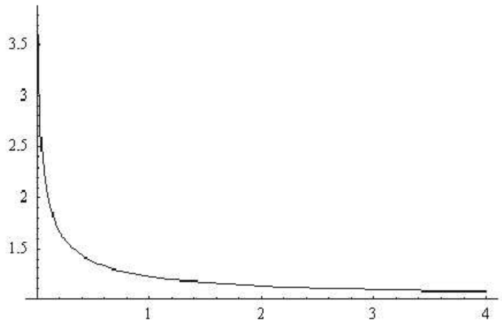

Рис. 4. Відношення критичної температури шорсткування, отриманої в наближенні сильної анізотропії до точного результату залежно від ступеня неоднорідности ґратки (K_{2y}/K_{2x}) для BCSOS-моделі.

Розгляньмо підхід одного перекиду, який дозволяє суттєво спростити обчислення трансфер-матриці в наближенні сильної анізотропії. Повернімося до питання про вигляд позадіягональної частини трансфер-матриці T^y. Узявши до уваги, що $\beta K_{2y} \gg 1$, потрібно знайти такий оператор T^y, що $T^y|h\rangle$ є сумою усіх станів, що відрізняється від $|h\rangle$ висотою лише на одному вузлі

$$T^y|h\rangle = |h\rangle + \mathrm{e}^{-\beta K_{2y}}\sum_k(|\ldots h_k+1\ldots\rangle+|\ldots h_k-1\ldots\rangle). \tag{4.5}$$

Усіма іншими доданками можна знехтувати, оскільки больцманівські множники будуть пропорційними квадратові $\mathrm{e}^{-\beta K_{2y}}$. Шуканий оператор має вигляд $T^y = 1+\mathrm{e}^{\frac{J}{2}}\sum_j P_{j-1,j}P_{j,j+1}(\mathrm{e}^{iU_j}+\mathrm{e}^{-iU_j})$. У спіновому зображенні це відповідає сумі одиничного оператора й операторів перекиду спіну $T^y = 1+\mathrm{e}^{\frac{J}{2}}\sum_j(s^-_{j-1}s^+_j + s^+_{j-1}s^-_j)$. 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 гамільтоніян (4.3).

Формально здійснити перехід від трансфер-матриці (3.5) до гамільтоніяна (4.3) можна в межі низьких температур $\beta \gg 1$. Оскільки потрібно знайти температуру фазового переходу, яка сумірна з одиницею, слід прийняти наближення сильної анізотропії. Для докладно розглянутої BCSOS-моделі існує точний розв'язок, тому виладені обчислення використовуються для перевірки прийнятности наближення сильної анізотропії й узгодження формулювання підходу одного перекиду з наближенням сильної анізотропії.

V. ВЗАЄМОДІЯ ДАЛЬШИХ, НІЖ НАЙБЛИЖЧІ, СУСІДІВ

Розгляньмо BCSOS-модель (1.1) з додатковою взаємодією вздовж осі x K_{4x}:

$$H=\sum_{i,j}\Big[K_{2x}\,(h_{i,j}-h_{i+2,j})^2+K_{2y}\,(h_{i,j}-h_{i,j+1})^2\Big] + \sum_{i,j}K_{4x}\,(h_{i,j}-h_{i+4,j})^2 . \tag{5.1}$$

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

Додатковий множник у гамільтоніяні (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 діягональна частина трансфер-матриці

$$T^x=\prod_j \mathrm{e}^{-\beta K_{2x}(s^z_{j-1}-s^z_j)^2+K_4(s^z_{j-2}+s^z_{j-1}+s^z_j+s^z_{j+1})^2}. \tag{5.2}$$

У наближенні сильної анізотропії гамільтоніян квантового відповідника матиме вигляд:

$$H=-\sum_j\frac{J}{2}(s^+_{j-1}s^-_j+s^-_{j-1}s^+_j) + \sum_j\left(J_z s^z_{j-1}s^z_j + J_2 s^z_j s^z_{j+2}+\frac{J_2}{2}s^z_j s^z_{j+3}\right), \tag{5.3}$$

де $J = 2\mathrm{e}^{-\beta K_{2y}}$, $J_z = 2\beta K_{2x}+\frac{3}{2}\beta K_4$, $J_2 = \beta K_4$. Ми отримали одновимірну спінову модель із взаємодією дальших, ніж найближчі, сусідів. В описаному підході можна врахувати й інші взаємодії (рис. 1). Так, можна ввести взаємодію вздовж рядка $\sim (h_{i,j}-h_{i+3,j})^2$, що приведе до перенормування коефіцієнтів при $s^z_j s^z_{j+1}$, $s^z_j s^z_{j+2}$ в гамільтоніяні. Можна врахувати взаємодію $\sim (h_{i+1,j}-h_{i,j\pm2})^2$, що в наближенні сильної анізотропії перенормує доданки $s^z_j s^z_{j+1}$.

VI. RSOS-МОДЕЛЬ

Моделі RSOS можна використовувати для опису поверхні (100) простого кубічного кристала. В цих моделях різниця між висотами найближчих вузлів обмежена певним числом; у найпростішому випадку, який і розглядатиметься далі, — одиницею. Найзагальніший гамільтоніян має вигляд [20]

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

де δ — символ Кронекера. Взаємодії зображено на рис. 5. Стан квантового гамільтоніяна і трансфер-матрицю визначимо на зиґзаґоподібному рядку. Відразу можна записати діягональну частину трансфер-матриці

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

де індекс рядка i опущено. Спінові стани s_j^z визначимо аналогічно, як у BCSOS-моделі, тому можна записати (6.2) через спін-1 оператори

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

Для того, щоб знайти позадіягональну частину трансфер-матриці, потрібно перейти до наближення сильної анізотропії. У цьому випадку слід знайти такий оператор, діючи яким на стан $|h\rangle$, отримуємо суму всіх допустимих станів $|h'\rangle$, що не відрізняються або відрізняються від $|h\rangle$ висотою тільки на одному вузлі. Таким оператором буде

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

де оператори u і P аналогічні до (3.3) з тією різницею, що проєкційні оператори дорівнюють, одиниці, якщо $|h_j - h_{j+1}| \leq 1$.

$\|j-1, j, j+1\rangle$	$P_{j-1,j}P_{j,j+1}\mathrm{e}^{iU_j}$	$P_{j-1,j}P_{j,j+1}\mathrm{e}^{-iU_j}$	$\|s_{j-1}^z s_j^z\rangle$	$s_{j-1}^+ s_j^-$	$s_{j-1}^- s_j^+$
$\|0,1,2\rangle$	0	0	$\|\uparrow\uparrow\rangle$	0	0
$\|0,1,1\rangle$	0	$\|0,0,1\rangle$	$\|\uparrow\rangle$	0	$\|0\uparrow\rangle$
$\|0,1,0\rangle$	0	$\|0,0,0\rangle$	$\|\uparrow\downarrow\rangle$	0	$\|00\rangle$
$\|0,0,1\rangle$	$\|0,1,1\rangle$	0	$\|0\uparrow\rangle$	$\|\uparrow 0\rangle$	0
$\|0,0,0\rangle$	$\|0,1,0\rangle$	$\|0,-1,0\rangle$	$\|00\rangle$	$\|\uparrow\downarrow\rangle$	$\|\downarrow\uparrow\rangle$
$\|0,0,-1\rangle$	0	$\|0,-1,-1\rangle$	$\|0\downarrow\rangle$	0	$\|\downarrow 0\rangle$
$\|0,-1,0\rangle$	$\|0,0,0\rangle$	0	$\|\downarrow\uparrow\rangle$	$\|00\rangle$	0
$\|0,-1,-1\rangle$	$\|0,0,-1\rangle$	0	$\|\downarrow 0\rangle$	$\|0\downarrow\rangle$	0
$\|0,-1,-2\rangle$	0	0	$\|\downarrow\downarrow\rangle$	0	0

Таблиця 2. Дія операторів P, U та спінових операторів у RSOS-моделі.

Множники із взаємодією K в експоненті враховують взаємодію між парними вузлами в $|h\rangle$ і непарними в $|h'_j\rangle$, чого для BCSOS-моделі не потрібно було робити, оскільки різниці найближчих висот у ній завжди $\frac{1}{2}$.

Нехтуючи некомутативністю операторів у показниках експоненти, що відповідає наближенню $\beta K \ll 1$, $\beta K_{2x} \ll 1$, $\beta L_{2x} \ll 1$, $\beta K_{2y} \gg 1$, $\beta L_{2y} \gg 1$, гамільтоніян одновимірної спінової системи зобразимо у вигляді $H = \ln T^y T^x$. Запишемо гамільтоніян виразу через спінові оператори (таблиця 2):

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

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

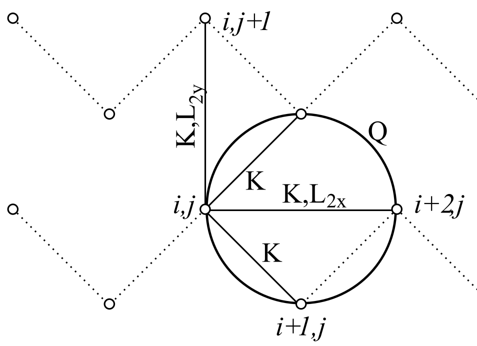

Рис. 5. RSOS-модель із взаємодіями K, K_{2x}, L_{2x}, K_{3y}, L_{4y}, Q. Поділ на рядки показано пунктирною лінією.

Докладний аналіз фазової діяграми отриманої спінової моделі виходить поза межі цієї роботи; з ним можна ознайомитися в уже згаданій праці ден Нійса і Ромелса [20]. Тут потрібно наголосити на важливих деталях. У моделі, залежно від знаків взаємодій K, L_1^x, L_2^x, можуть бути три впорядковані фази, що відповідають гладким фазам поверхні (гладкій RSOS, BCSOS і реконструйованій BCSOS фазі). У системі є також RSOS і BCSOS невпорядковані шорсткі фази, у яких на великих відстанях кореляційні функції $G(r) = \langle (h_i - h_{i+r})^2 \rangle \sim \ln r$. Існує також невпорядкована гладка фаза (DOF), у якій температурою зруйнований позиційний порядок сходинок поверхні догори–донизу, але залишається впорядкованою почерговість сходинок, що виражається відмінним від нуля параметром порядку $\psi = \langle \mathrm{e}^{i\pi h_i}(h_i - h_{i+1}) \rangle$. Усі описані фази мають відповідники "спіновою мовою". Гладкі фази відповідають феро- або антиферомагнетним основним станам спін-1 ланцюжка. Шорсткі фази — магнетно невпорядкованому основному станові, і невпорядкована гладка фаза — станові валентних зв'язків (VBS). Докладніше природу невпорядкованої гладкої фази буде обговорено на прикладі BCSOS-моделі.

VII. ОБГОВОРЕННЯ ФАЗОВОЇ ДІЯГРАМИ BCSOS-МОДЕЛІ, РЕКОНСТРУЙОВАНА І DOF ФАЗИ

Повернімося до розгляду BCSOS-моделі зі взаємодією K_{4x} (5.1). Деталі побудови фазової спінової діяграми основного стану можна знайти в роботі [21]. Тут представлено лише якісну поведінку поверхні при зміні температури (рис. 6). Основний стан поверхні, залежно від знака K_{2x}, є гладким $[1\times1]$ або гладким реконструйованим $[1\times2]$. Із підвищенням температури відбувається перехід до шорсткої фази, можливо, з переходом через посередню DOF фазу. У деяких випадках основний стан відомий точно і характеристики поверхні можна знайти докладно. Ці точки — це класичні стани Нієля, що відповідають нулеві температури (або $K_{2y} \to \infty$); стан ідеально димеризованого стану, що відповідає ланцюжкові Маджумдара–Ґоша [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-ланцюжкові ($K_{2x} = 0, K_{4x} = 0$ або $T \to \infty$). У перерахованих випадках відомо точний вигляд кореляційних функцій спінової системи.

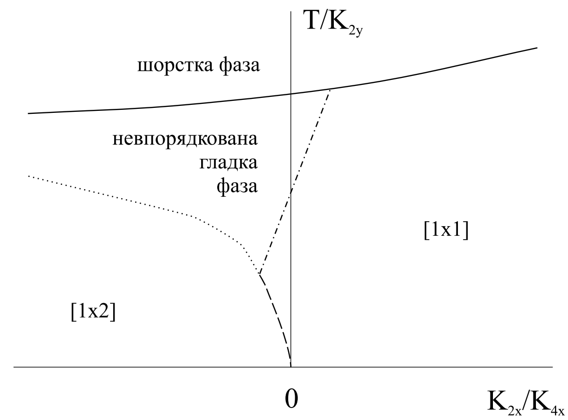

Рис. 6. Якісна фазова діяграма для BCSOS-моделі. По осях відкладено анізотропію й температуру. Суцільна крива відповідає переходові Костерліца–Таулеса, штрихована — фазовим переходам першого роду між двома гладкими фазами, крапкована — Ізинґовій критичній поведінці. Штрих-пунктирна лінія відображає криву фазових переходів другого роду з постійно змінними критичними показниками.

Кореляційну функцію висота-висота можна записати через двоспінові кореляційні функції

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

за умови трансляційної інваріянтности спінових кореляційних функцій отримаємо

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

Загалом, точні вирази для спінових кореляційних функцій невідомі, але для визначення асимптотичної поведінки $\lim_{n\to\infty} G(n)$ потрібно знати лише асимптотичну поведінку кореляційних функцій $\langle s_0^z s_j^z\rangle_0$. Крім того, усі доданки, які пропорційні n у фазах, де сумарне намагнічення дорівнює нулеві (а саме такими є всі фази, які нас цікавлять) при обчисленні $G(n)$, за умови великих n, прямують до сталої. Остаточно вираз для асимптотичної поведінки кореляційної функції, за умови великих n, матиме вигляд

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

Параметром порядку спінової моделі у фазі $[1\times 1]$ є “шахоподібне намагнічення” $P_1 = (\frac{1}{N}\sum_j(-1)^j\langle s_j^z\rangle_0)^2$, а у фазі $[1\times 2]$ 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 далеких відстанях до певного скінченного значення. З (7.3) видно, що в гладких фазах $G(n) < \text{const}$. В ідеально впорядкованих станах $[1\times 1]$ і $[1\times 2]$ спінові кореляційні функції відомі і можна знайти $G(n)$ точно — $G(n) = \frac{1}{8}(1-(-1)^n)$ для фази $[1\times 1]$ та $G(4n) = 0, G(4n+1,3) = \frac{1}{4}, G(4n+2) = 1$ для фази $[1\times 2]$.

У фазі спінової рідини відсутнє впорядкування, а спінові кореляційні функції є такими [22]: $\langle s_0^z s_j^z\rangle_0 = -\frac{1}{4\pi^2\eta j^2} + (1)^j\frac{A}{j^{1/\eta}} + \ldots$, що дозволяє за допомогою (7.3) знайти асимптотику кореляційної функції $G(n) \sim \ln(n)$. Для 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 $\gamma \simeq 0.577$ — стала Ейлера, Γ — 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 дає змогу знайти асимптотику кореляційних функцій $G(n) < \text{const}$, а у випадку ідеальної димеризації можна 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 ніелівські стани $[1\times 1]$ і $[1\times 2]$ є дво- і чотирикратно виродженими, а димеризований стан — двократно виродженим. Ми обмежились розглядом тільки одного з вироджених станів, оскільки інші тривіально отримуємо просторовою трансляцією.

Параметри порядку для спінових систем потрібно пов’язати з певними величинами, означеними мовою поверхні. Основною проблемою є те, що, отримуючи спінову модель, припускаємо просторову неоднорідність, і будь-яка величина, що визначена на спінових операторах, враховуватиме існування чи відсутність впорядкування лише в одному напрямку. Розгляньмо докладніше ідеальний димеризований стан.

$$|\Psi\rangle = |12\rangle|34\rangle\ldots|N-1N\rangle, \tag{7.4}$$

де $|ij\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$. Якщо розписати добуток синґлетів (7.4), то отримаємо $2^{\frac{N}{2}}$ доданків, кожен з яких буде таким:

$$(\uparrow\downarrow)(\uparrow\downarrow)(\downarrow\uparrow)(\downarrow\uparrow)(\downarrow\uparrow)(\uparrow\downarrow)\ldots. \tag{7.5}$$

Видно, що в конфіґурації зустрічаються два спіни, орієнтовані вниз, що відповідає на поверхні сходинці вниз. Далі — антиферомагнетно впорядкований відрізок і два спіни орієнтовані вверх, що відповідає сходинці вверх. Оскільки кожен із доданків типу (7.5) складається з добутків синґлетів на сусідніх вузлах, то це означає, що завжди після двох сусідніх спінів, орієнтованих вниз (сходинки вниз), ідуть два спіни, орієнтовані вверх (сходинки вверх), і навпаки. Отже, поверхня залишається гладкою, але в цій фазі втрачено порядок сходинок у площині.

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

$$\langle\Psi|\text{Step}_j\text{Step}_{j+n}|\Psi\rangle = \begin{cases} \frac{1}{2} & \text{якщо } n = 0, \\ \frac{1}{4} & \text{якщо } n \geq 2 \text{ і парне}, \\ 0 & \text{інакше}, \end{cases} \tag{7.6}$$

це означає, що відстань між сходинкам завжди парна. У праці [23] методом точної діягоналізації пораховано кореляційну функцію сходинка-сходинка для системи, що перебуває в DOF-фазі, але не допускає точного розв’язку. Показано, що $\langle\Psi|\text{Step}_j\text{Step}_{j+n}|\Psi\rangle$ на великих віддалях спадає до нуля, але має осциляційний характер з періодом π — сходинки воліють розміщуватися одна щодо одної на парній віддалі.

Між сходинками розташовані відрізки нієлівського впорядкування. Якщо поділити ґратку на дві підґратки (з парними й непарними вузлами), то відрізки з максимумами, що відповідають одній з них, траплятимуться частіше. Інакше кажучи, вузли однієї з підґраток переважають серед локальних максимумів. Це спостереження підказує, як побудувати параметр порядку на поверхні, який би виокремив DOF-фазу:

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

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

де G — вектор оберненої ґратки. Результат дії оператора O_r відмінний від нуля тільки тоді, коли на вузлі r є локальний максимум поверхні. Якщо $P_{\rm DOF}$ відмінне від нуля, то це вказує на переважання вузлів певної підґратки на верхньому шарі поверхні (рис. 1). У роботі [23], [24] обчислення методом Монте-Карло підтверджують, що в DOF-фазі $P_{\rm DOF}$ відмінне від нуля. Властивості всіх фаз підсумовано в таблиці 3.

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

Таблиця 3. Характеристики фаз, що зображені на фазовій діяграмі (рис. 6) для BCSOS-моделі (5.1).

VIII. ПІДСУМОК

Кристалічні поверхні виявляють багату критичну поведінку і мають широке практичне застосування. Експериментально підтверджено існування всіх описаних у цьому розділі сценаріїв — реконструкції, передшорсткування й шорсткування, хоча експериментальне дослідження двох останніх переходів стикається з труднощами з огляду на безмежний порядок переходу шорсткування та неуніверсальність передшорсткування. З другого боку, саме ці два типи фазових переходів підтримують постійне академічне зацікавлення дискретними моделями поверхні.

Аналогія SOS-моделей із квантовими спіновими одновимірними системами дає змогу використати результати теорії низьковимірного магнетизму у вивченні поверхневих фазових переходів. Саме ця аналогія дозволяє описати невпорядковану гладку фазу, побудувати для неї параметр порядку та з'ясувати різну роль далекосяжних взаємодій в утворенні невпорядкованої гладкої фази в BCSOS- і RSOS-моделях.

У межах описаного підходу є можливість суттєво розширити клас вивчених явищ на поверхні. Можна врахувати структурну неоднорідність поверхні, що приведе до неоднорідности zz-взаємодій у спіновій моделі. Такі неоднорідності виявлено в металах Wo, Mo [25] і напівпровідниках. Іншим перспективним напрямком є врахування фононних ступенів вільностей поверхні.

[1] C. Hofner, J. W. Rabalais, Phys. Rev. B **58**, 9990 (1998).
[2] I. Vilfan, J. Villain, Surf. Sci. **257**, 368 (1991).
[3] L. Barbier, B. Salanon, J. Sposser, J. Vac. Sci. Technol. A **13(1)** 117 (1995).
[4] M. A. Krzyzowski *et al.*, Phys. Rev. B **50**, 18505 (1994).
[5] H. N. Yang, T. M. Lu, G. C. Wang, Phys. Rev. B **43**, 4714 (1991).
[6] Y. Cao, E. H. Conrad, Phys. Rev. Lett. **64**, 447 (1990).
[7] G. A. Held, J. L. Jordan-Sweet, P. M. Horn, A. Mak, R. J. Birgeneau, Phys. Rev. Lett. **59**, 2075 (1987).
[8] P. Zeppenfeld, K. Kern, R. David, G. Comsa, Phys. Rev. Lett. **62**, 63 (1989).
[9] P. Day, M. LaMadrid, M. Lysek, D. Goodstein, Phys. Rev. B **47**, 7501 (1993).
[10] H. S. Youn, X. F. Meng, G. B. Hess, Phys. Rev. B **48**, 14556 (1993).
[11] D. Davidson, M. den Nijs, Phys. Rev. E **55**, 1331 (1997).
[12] S. B. Zhang, A. Zunger, Phys. Rev. B **53**, 1343 (1996).
[13] V. P. LaBella, D. W. Bullock, M. Anser, Z. Ding, C. Emery, L. Bellaiche, P. M. Thibado, Phys. Rev. Lett. **90**, 216109 (2003).
[14] S. T. Chui, J. D. Weeks, Phys. Rev. B **14**, 4978 (1976).
[15] H. van Beijeren, Phys. Rev. Lett. **38**, 993 (1977).
[16] V. P. Zhdanov, B. Kasemo, J. Chem. Phys. **108**, 4582 (1998).
[17] Р. Бэкстер, *Точно решаемые модели в статистичес-*

кой механике, (Москва, Мир, 1985).
[18] J. B. Kogut, Rev. Mod. Phys. **51**, 659 (1979).
[19] A. Auerbach, *Interacting Electrons and Quantum Magnetism*, (New York, Springer-Verlag, 1994).
[20] M. den Nijs, K. Rommelse, Phys. Rev. B **40**, 4709 (1989).
[21] G. Santoro, M. Fabrizio, Phys. Rev. B **49**, 13886 (1994).
[22] T. Hikihara, A. Furusaki, Phys. Rev. B **58**, R583 (1998).
[23] G. Santoro *et al.*, Phys. Rev. B **53**, 13169 (1996).
[24] S. Prestipino, E. Tosatti, Phys. Rev. B **57**, 10157 (1998).
[25] T. E. Felter, R. A. Barker, P. J. Estrup, Phys. Rev. Lett. **38**, 1138 (1977).

DISCRETE LATTICE SURFACE MODELS AND THEIR QUANTUM SPIN COUNTERPARTS

O. Zaburannyi
Institute for Condensed Matter Physics of NAS of Ukraine
1 Svientsitskii St., Lviv, UA–79011, Ukraine, e-mail: zab@icmp.lviv.ua

The review is devoted to the study of discrete surface models and their quantum spin counterparts. The work examines temperature transitions between flat, rough, reconstructed, and disordered flat phases. The fundamental aspect of the work is the transfer matrix method used for the description of temperature SOS models behaviour. The order parameters for surface phases and the quantum spin systems phases at zero temperature are confronted by the mean of transfer matrix method. The dependence is set between the asymptotic of correlation functions height–height and spin correlation functions.