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/)

Тарас Михайлович Верхоляк

Метод трансфер-матриці та пошук квантових гамільтоніанів для модифікованих BCSOS моделей поверхні

Роботу отримано 10 листопада 2008 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку відділом квантово-статистичної теорії процесів каталізу

Виготовлено при ІФКС НАН України

Національна академія наук України

ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP–08–12U

Т.М.Верхоляк

МЕТОД ТРАНСФЕР-МАТРИЦІ ТА ПОШУК КВАНТОВИХ ГАМІЛЬТОНІАНІВ ДЛЯ МОДИФІКОВАНИХ BCSOS МОДЕЛЕЙ ПОВЕРХНІ

ЛЬВІВ

УДК: 532.6

PACS: 68.35.Ct, 68.60.Dv

Метод трансфер-матриці та пошук квантових гамільтоніанів для модифікованих BCSOS моделей поверхні

Т.М.Верхоляк

Анотація. В роботі розглянуто об'ємоцентровану модель поверхні типу тверде тіло-тверде тіло та її узагальнення на випадок взаємодії дальших за найближчих сусідів, а також двосортної поверхні. Використовуючи метод трансфер-матриці, проблему зведено до дослідження основного стану одновимірних квантових спінових моделей. При цьому показано, що врахування далекої взаємодії може приводити до появи конкуруючих взаємодій у квантовому ланцюжку, в той час як двосортній поверхні відповідає періодичний квантовий ланцюжок. Також аналізується можливість опису поверхні GaAs в межах згаданих моделей.

Transfer-matrix method and search of quantum hamiltonians for modified BCSOS surface models

T.M.Verkholyak

Abstract. In the paper the BCSOS model of a surface and its generalization for the case of further interactions and for the case of the two-component surface is considered. Using the transfer-matrix method the problem is reduced to the study of the ground state of one-dimensional quantum spin models. It is shown that further than the nearest neighbor interactions may lead to the appearance of competing interactions in a quantum chain, whereas for the two-component surface the correspondence to the periodic quantum chain has been found. The possibility of the description of the GaAs surface within the mentioned models has been also analyzed.

Подається в Український фізичний журнал
Submitted to Ukrainian Journal of Physics

1. Вступ

Поверхні є об'єктом численних досліджень сучасного матеріалознавства через різноманітні технологічні застосування зумовлені особливостями електронних, магнітних, структурних властивостей поверхонь, які можуть значно відрізнятись від їх об'ємних властивостей [1]. В даному розділі розглядаються структурні властивості поверхні, які допускають опис в межах граткових моделей [2]. Моделі типу SOS (solid on solid, тверде тіло на твердому тілі) розглядають поверхню, як набір взаємодіючих стовпців зі змінною висотою [3]. Висота стовпців кратна сталій гратки. Характеристикою структури поверхні є кореляційна функція висота-висота $G(\mathrm{R}-\mathrm{R}') = \langle (h(R)-h(R'))^2 \rangle$, яка описує ступінь її неоднорідності. При підвищенні температури до критичного значення T_R $G(\mathrm{R})$ починає розбігатися з відстанню як $\ln(R)$, і це є ознакою утворення шорсткої фази поверхні.

Експериментально явище шорсткування поверхні спостерігається в більшості кристалів. Поверхні двовалентних металів, а також напівпровідників виявляють навіть складнішу поведінку [1]. При низьких температурах в них виявлено реконструйовані 2×1 структури. Узгоджений опис явищ реконструкції та шорсткування поверхні є можливим при включенні в моделі поверхні конфігураційної взаємодії між елементами, які не межують один з одним [4]. Такі моделі є складним об'єктом досліджень і одним із способів розгляду є зведення задачі до дослідження основного стану одновимірних квантових спінових моделей [5, 6].

В даній роботі розглянуто метод відображення BCSOS моделі (об'ємоцентрованої моделі тверде тіло на твердому тілі) на задачу про основний стан квантових спін-$\frac{1}{2}$ ланцюжків. В наступному розділі модель поверхні переписано в термінах двовимірної моделі Ізінга з умовою шестивершинної моделі та знайдено її трансфер-матрицю в операторній формі. В розділі 3 метод трансфер-матриці узагальнюється на випадок BCSOS модель з дальшими взаємодіями і отримується відповідний їй гамільтоніан квантового спінового ланцюжка. В розділі 4 двосортна BCSOS модель застосовується до опису деяких іонних кристалів, та розглядається можливість опису в її межах напівпровідникової сполуки GaAs.

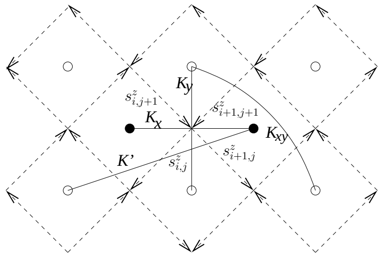

Рис. 1. BCSOS модель поверхні об'ємоцентрованої гратки. Різниця висот сусідніх вузлів з темними і світлими кружечками становить половину сталої гратки.

2. Метод трансфер-матриці та аналогія з шестивершинною моделлю

Розглянемо так звану BCSOS модель (об'ємоцентровану модель тверде тіло на твердому тілі), яка описує дискретну поверхню квадратної гратки, сусідні елементи якої мають різницю висот $a/2$ (a — період гратки) [7]. Поверхня [001] об'ємоцентрованої гратки схематично зображена на рис.1. Дві висоти в напрямку x (y) можуть відрізнятись лишень на сталу гратки і енергія зв'язку між ними $K_x > 0$ ($K_y > 0$). В такій моделі сходинки між сусідніми елементами поверхні можна ідентифікувати з спінами 1/2, таким чином, що стовпець справа від напрямку спіна має більшу висоту (див. рис.1). Для визначеності вважатимемо спіни $+1/2$ ($-1/2$), якщо вони спрямовані вгору (вниз). Енергії сходинок можна виразити через суму спінів, записавши їх як гамільтоніан двовимірної моделі Ізінга:

$$H = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{M}(K_x(s^z_{i,j}+s^z_{i+1,j})^2 + K_y(s^z_{i,j}+s^z_{i,j+1})^2), \qquad (2.1)$$

де покладено періодичні граничні умови $s^z_{i+N,j} = s^z_{i,j}$, $s^z_{i,j+M} = s^z_{i,j}$. Для того щоб ототожнити спіновий гамільтоніан з BCSOS моделлю, потрібно накласти додаткову умову на спінові оператори:

$$s^z_{i,j} + s^z_{i+1,j+1} = s^z_{i+1,j} + s^z_{i,j+1} \qquad (2.2)$$

для $i + j = 2n$. Ця умова обмежує число станів навколо вершини, де сходяться чотири сусідні висоти, шістьома, що і відповідає шестивершинній моделі.

Статистичну суму моделі можна виразити як добуток трансфер-матриць (див. наприклад [8]):

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{s_{1,1},\dots s_{N,1}} \dots \sum_{s_{1,M},\dots s_{N,M}} \exp(-\beta H) \\ &= \sum_{s_{1,1},\dots s_{N,1}} \dots \sum_{s_{1,M},\dots s_{N,M}} T^{s_{1,1},\dots,s_{N,1}}_{1 s_{1,2},\dots,s_{N,2}} T^{s_{1,2},\dots,s_{N,2}}_{2 s_{1,3},\dots,s_{N,3}} \dots \\ &\times\ T^{s_{1,M},\dots,s_{N,M}}_{2 s_{1,1},\dots,s_{N,1}} = \mathrm{Tr}(T_1T_2)^{M/2}. \end{aligned} \qquad (2.3)$$

В свою чергу матриці T_1, T_2, які задані на просторі $2^{\otimes N}$, є прямим добутком матриць 2×2:

$$T^{s_1,\dots,s_N}_{1 s'_1,\dots,s'_N} = \prod_{i=1}^{N/2} t^{s_{2i-1},s_{2i}}_{s'_{2i-1},s'_{2i}}, \quad T^{s_1,\dots,s_N}_{2 s'_1,\dots,s'_N} = \prod_{i=1}^{N/2} t^{s_{2i},s_{2i+1}}_{s'_{2i},s'_{2i+1}}, \qquad (2.4)$$

$$\begin{aligned} t^{s_i,s_{i+1}}_{s'_i,s'_{i+1}} &= \mathrm{e}^{-\beta(K_x(s^z_i+s^z_{i+1})^2 + K_y(s^z_i+s'^z_i)^2)} \\ &= \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{-\beta K_x} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \mathrm{e}^{-\beta K_y} & 0 \\ 0 & \mathrm{e}^{-\beta K_y} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mathrm{e}^{-\beta K_x} \end{pmatrix}. \end{aligned} \qquad (2.5)$$

Формулу (2.5) легко виразити через прямий добуток матриць Паулі σ^α, або матриць $s^\alpha = \frac{1}{2}\sigma^\alpha$:

$$\begin{aligned} t^{s_i,s_{i+1}}_{s'_i,s'_{i+1}} = \Big(&\frac{\mathrm{e}^{-\beta K_x}+1}{2}\hat{1}\otimes\hat{1} + 2(\mathrm{e}^{-\beta K_x}-1)\hat{s}^z\otimes\hat{s}^z \\ &+\mathrm{e}^{-\beta K_y}(\hat{s}^+\otimes\hat{s}^- + \hat{s}^-\otimes\hat{s}^+)\Big). \end{aligned} \qquad (2.6)$$

Якщо ввести позначення $s^\alpha_i = \underbrace{\hat{1}\otimes\hat{1}\dots\otimes\hat{1}\otimes}_{i-1}\hat{s}^\alpha\otimes\hat{1}\dots\otimes\hat{1}$, то можна записати

$$\begin{aligned} t_{i,i+1} &= \underbrace{\hat{1}\otimes\hat{1}\dots\otimes\hat{1}\otimes}_{i-1} t^{s_i,s_{i+1}}_{s'_i,s'_{i+1}}\otimes\hat{1}\dots\otimes\hat{1} \\ &= \frac{\mathrm{e}^{-\beta K_x}+1}{2} + 2(\mathrm{e}^{-\beta K_x}-1)s^z_i s^z_{i+1} + \mathrm{e}^{-\beta K_y}(s^+_i s^-_{i+1} + s^-_i s^+_{i+1}) \\ &= \mathrm{e}^{-2\beta K_x(s^z_i s^z_{i+1}+\frac{1}{4})}\left(1+\mathrm{e}^{-\beta K_y}(s^+_i s^-_{i+1} + s^-_i s^+_{i+1})\right) \end{aligned} \qquad (2.7)$$

В результаті трансфер-матриці T_1 та T_2 зображуються через добуток спінових операторів:

$$T_1 = \prod_{i=1}^{N/2} \mathrm{e}^{-2\beta K_x(s^z_{2i-1}s^z_{2i}+\frac{1}{4})}\left(1+\mathrm{e}^{-\beta K_y}(s^+_{2i-1}s^-_{2i} + s^-_{2i-1}s^+_{2i})\right)$$

$$T_2 = \prod_{i=1}^{N/2} \mathrm{e}^{-2\beta K_x(s^z_{2i}s^z_{2i+1}+\frac{1}{4})} \left(1+\mathrm{e}^{-\beta K_y}(s^+_{2i}s^-_{2i+1}+s^-_{2i}s^+_{2i+1})\right). \quad (2.8)$$

Згідно (2.3) статистична сума $Z = \mathrm{Tr}(T)^{M/2}$, де $T = T_1T_2$. Якщо вважати, що власні значення Λ_i матриці T відомі, то статистична сума $Z = \sum_{i=1}^{2^N} \Lambda_i^{M/2}$. Визначення власних значень трансфер-матриці є в загальному випадку складною задачею, тому зручно записати її у формі $T = \exp(-H_q)$, де H_q – деякий оператор, назвемо його гамільтоніаном квантової моделі. З точністю до $\mathrm{e}^{-\beta K_y}$, або в так званому наближенні одного перекиду [9] отримаємо гамільтоніан спін$-\frac{1}{2}$ XXZ моделі Гайзенберга:

$$H_q = \sum_{i=1}^{N} J^z s^z_i s^z_{i+1} + J^{xx}(s^x_i s^x_{i+1} + s^y_i s^y_{i+1}). \quad (2.9)$$

Тут введено такі позначення для $J^z = 2\beta K_x$, $J^{xx} = -2\mathrm{e}^{-\beta K_y}$. Найменше власне значення E_0 гамільтоніану відповідатиме найбільшому власному значенню трансфер-матриці, а вільна енергія поверхні на один вузол матиме такий вигляд в термодинамічній границі $f = e_0/(2\beta)$. Кореляційну функцію висота-висота теж можна виразити через спінові кореляційні функції:

$$G(\mathbf{R}_{i+n,j} - \mathbf{R}_{i,j}) = \langle \left(\sum_{l=i+1}^{i+n} s^z_l\right)^2 \rangle = \frac{n}{4} + 2 \sum_{l,l'=i+1(l\neq l')}^{i+n} \langle s^z_l s^z_{l'} \rangle \quad (2.10)$$

Слід зауважити, що одновимірна XXZ модель зазнає квантового фазового переходу в основному стані при $J^z = |J^{xx}|$ [15]. Якщо $J^z > |J^{xx}|$, система перебуває в антиферомагнітному стані, а її кореляційні функції затухають експонентно. Згідно (2.10) кореляційна функція висота-висота має таку ж асимптотичну поведінку, а отже, антиферомагнітна фаза відповідатиме гладкій фазі поверхні [6]. Протилежний випадок $J^z < |J^{xx}|$ відповідає фазі спінової рідини, в якій спінові кореляційні функції затухають степенево, що веде до логарифмічної розбіжності у $G(R)$. Звідси видно, що фаза спінової рідини відповідає шорсткій фазі поверхні.

3. Врахування взаємодії між дальшими сусідами в моделях реконструкції поверхні

BCSOS модель з взаємодією між найближчими сусідами, розглянута в попередньому розділі, дозволяє описати лишень прості поверхні в яких відсутні впорядкування. Для опису реконструкції поверхні враховують дальші взаємодії між елементами поверхні [4,10]. Зокрема, BCSOS модель із взаємодією K_{xy} (див. рис.1) розглянута в роботі [10] числовим методом, який грунтується на розрахунку трансфер-матриці скінченних систем та скінченно-розмірному скейлінгу. Авторами було отримано фазову діаграму моделі, та виявлено, що достатньо сильна взаємодія між наступними після найближчих сусідів призводить до виникнення реконструйованої поверхні 2×2. В даному розділі шукаємо зображення згаданої моделі на квантовий спіновий ланцюжок. Спочатку зауважимо, що взаємодія K_{xy} додає до гамільтоніану (2.1) такий вклад:

$$H^{(1)} = \sum_{i,j}{}' K_{xy}\left((s^z_{i,j}+s^z_{i+1,j+1})^2 + (s^z_{i,j+1}+s^z_{i+1,j})^2\right), \quad (3.1)$$

де $\sum'_{i,j}$ означає суму за такими індексами i, j, що задовільняють умову $i+j$ – непарне число. В цьому випадку зображення статистичної суми у формі (2.3) далі справедливе, але форма самих трансфер-матриць T_1 та T_2 змінюється:

$$T^{s_1,\ldots,s_N}_{1s'_1,\ldots,s'_N} = \prod_{i=1}^{N/2} t^{s_{2i-1},s_{2i}}_{s'_{2i-1},s'_{2i}} t^{(1)s_{2i},s_{2i+1}}_{s'_{2i},s'_{2i+1}},$$
$$T^{s_1,\ldots,s_N}_{2s'_1,\ldots,s'_N} = \prod_{i=1}^{N/2} t^{s_{2i},s_{2i+1}}_{s'_{2i},s'_{2i+1}} t^{(1)s_{2i+1},s_{2i+2}}_{s'_{2i+1},s'_{2i+2}}, \quad (3.2)$$

де

$$t^{(1)s_i,s_{i+1}}_{s'_i,s'_{i+1}} = \mathrm{e}^{-\beta(K_{xy}((s^z_i+s'^z_{i+1})^2+(s'^z_i+s^z_{i+1})^2))}$$
$$= \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{-2\beta K_{xy}} & \mathrm{e}^{-\beta K_{xy}} & \mathrm{e}^{-\beta K_{xy}} & 1 \\ \mathrm{e}^{-\beta K_{xy}} & 1 & \mathrm{e}^{-2\beta K_{xy}} & \mathrm{e}^{-\beta K_{xy}} \\ \mathrm{e}^{-\beta K_{xy}} & \mathrm{e}^{-2\beta K_{xy}} & 1 & \mathrm{e}^{-\beta K_{xy}} \\ 1 & \mathrm{e}^{-\beta K_{xy}} & \mathrm{e}^{-\beta K_{xy}} & \mathrm{e}^{-2\beta K_{xy}} \end{pmatrix}. \quad (3.3)$$

На відміну від попереднього випадку знайти трансфер-матрицю в операторній формі неможливо, оскільки матриці мають заплутані індекси. З іншого боку можна виділити в матриці $t^{(1)}$ одиничний вклад і записати її у формі $t^{(1)} = \frac{\mathrm{e}^{-\beta 2K_{xy}}+1}{2}(\check{\mathrm{I}} + \delta t^{(1)})$, де $\check{\mathrm{I}}$ – матриця всі елементи якої одиниці. Далі збережемо в трансфер-матриці тільки доданки лінійні за $\delta t^{(1)}$:

$$T^{s_1,\ldots,s_N}_{1s'_1,\ldots,s'_N} \approx \prod_{i=1}^{N/2} t^{s_{2i-1},s_{2i}}_{s'_{2i-1},s'_{2i}} + \sum_{m=1}^{N/2} \prod_{i\neq m,m+1} t^{s_{2i-1},s_{2i}}_{s'_{2i-1},s'_{2i}}$$

$$
\begin{aligned}
&\times t^{s_{2m-1},s_{2m}}_{s'_{2m-1},s'_{2m}} \delta t^{(1)s_{2m},s_{2m+1}}_{s'_{2m},s'_{2m+1}} t^{s_{2m+1},s_{2m+2}}_{s'_{2m+1},s'_{2m+2}},\\
T^{s_1,\dots,s_N}_{2s'_1,\dots,s'_N} \approx &\prod_{i=1}^{N/2} t^{s_{2i},s_{2i+1}}_{s'_{2i},s'_{2i+1}} + \sum_{m=1}^{N/2} \prod_{i\neq m,m+1} t^{s_{2i},s_{2i+1}}_{s'_{2i},s'_{2i+1}}\\
&\times t^{s_{2m},s_{2m+1}}_{s'_{2m},s'_{2m+1}} \delta t^{(1)s_{2m+1},s_{2m+2}}_{s'_{2m+1},s'_{2m+2}} t^{s_{2m+2},s_{2m+3}}_{s'_{2m+2},s'_{2m+3}},
\end{aligned} \tag{3.4}
$$

Після ряду обчислень отримується

$$
\begin{aligned}
&\Delta t_{m-1,m,m+1,m+2}\\
&= \underbrace{\hat{1}\otimes\hat{1}\ldots\otimes\hat{1}\otimes}_{m-2} t^{s_{m-1},s_m}_{s'_{m-1},s'_m} \delta t^{(1)s_m,s_{m+1}}_{s'_m,s'_{m+1}} t^{s_{m+1},s_{m+2}}_{s'_{m+1},s'_{m+2}} \otimes \hat{1}\ldots\otimes\hat{1}\\
&= \mathrm{e}^{-2\beta K_x(s^z_{m-1}s^z_m + s^z_{m+1}s^z_{m+2}+\frac{1}{2})} \big(\Delta_1 s^z_m s^z_{m+1}\\
&+\Delta_2 \mathrm{e}^{-\beta K_y}(s^+_{m-1}s^-_m + s^-_{m-1}s^+_m + s^+_{m+1}s^-_{m+2} + s^-_{m+1}s^+_{m+2})\\
&-\Delta_1 \mathrm{e}^{-2\beta K_y}(s^+_{m-1}s^-_m - s^-_{m-1}s^+_m)(s^+_{m+1}s^-_{m+2} - s^-_{m+1}s^+_{m+2})\big),
\end{aligned} \tag{3.5}
$$

де $\Delta_1 = \tanh(\beta K_{xy})$, $\Delta_2 = (1-\cosh(\beta K_{xy}))/\cosh(\beta K_{xy})$. Використавши (2.7), (3.5), можна знайти трансфер-матриці T_1, T_2 в операторній формі, а потім і гамільтоніан відповідної квантової моделі в наближенні одного перекиду. Він також матиме вигляд XXZ моделі Гайзенберга (2.9), проте з перенормованими константами взаємодії:

$$
\tilde{J}^z = 2\beta(K_x + 2K_{xy}),\ \ \tilde{J}^{xx} = 2\mathrm{e}^{-\beta K_y}/\cosh(\beta K_{xy}). \tag{3.6}
$$

Очевидно, що врахування взаємодії K_{xy} у найнижчому порядку не призводить до якісних змін у поведінці поверхні, оскільки зводиться до попередньо отриманої XXZ моделі. Вплив цієї взаємодії можна прослідкувати з $\tilde{J}^z$, $\tilde{J}^{xx}$ (3.6): додатня K_{xy} збільшує енергію неоднорідностей, що проявляється у спіновій моделі ростом $\tilde{J}^z$ і вищою температурою переходу до шорсткої фази у моделі поверхні. Від'ємна K_{xy} має протилежний ефект. Зауважимо, що оскільки з самого початку K_{xy} вважалось малим, отриманий квантовий гамільтоніан не дає змоги описати ефекти реконструкції поверхні, які стають можливими лише при сильніших далеких взаємодіях.

Наступна після K_{xy} взаємодія — це взаємодія між парами вузлів $[h_{i,j}, h_{i+3,j+1}]$, $[h_{i,j}, h_{i+3,j-1}]$, $[h_{i,j}, h_{i+1,j+3}]$, $[h_{i,j}, h_{i+1,j-3}]$. Різницю між висотами на вузлах неважко виразити через спіни. Так $h_{i,j} - h_{i+3,j+1} = -(s^z_{i,j+1} + s^z_{i+1,j+1} + s^z_{i+2,j+1})$, $h_{i,j} - h_{i+3,j-1} = -(s^z_{i,j} + s^z_{i+1,j} + s^z_{i+2,j})$, $h_{i,j} - h_{i+1,j+3} = -(s^z_{i,j+1} - s^z_{i,j+2} + s^z_{i,j+3})$, $h_{i,j} - h_{i+1,j-3} = (s^z_{i,j+1} - s^z_{i,j-1} + s^z_{i,j-2})$. Останні два вирази пов'язують у гамільтоніані не лишень сусідні, а й дальші ланцюжки. Внаслідок цього формалізм трансфер-матриці вже не може бути легко застосований. В загальному випадку потрібно розглядати трансфер-матрицю збудовану на чотирьох ланцюжках, що імовірно приведе до квантової моделі двох взаємодіючих спінових ланцюжків. Якщо ж відкинути ці доданки і розглянути випадок анізотропії у x напрямку [4], то енергія цієї взаємодії враховується таким внеском у гамільтоніан:

$$
H^{(2)} = \sum_{i,j} K'(s^z_{i,j} + s^z_{i+1,j} + s^z_{i+2,j})^2. \tag{3.7}
$$

В даному випадку трансфер-матриці моделі зручно зобразити як добуток двох складових: поздовжньої, яка містить спінові оператори одного ланцюжка, і поперечної, яка описує міжланцюжкову взаємодію:

$$
\begin{aligned}
T^{s_1,\dots,s_N}_{(1,2)s'_1,\dots,s'_N} &= \sum_{s''_1,\dots,s''_N} T^{s_1,\dots,s_N}_{(1,2)xs''_1,\dots,s''_N} T^{s''_1,\dots,s''_N}_{(1,2)ys'_1,\dots,s'_N}, && (3.8)\\
T^{s_1,\dots,s_N}_{(1,2)xs''_1,\dots,s''_N} &= \mathrm{e}^{-\beta\sum_i\left(\frac{K_x}{2}(s^z_i+s^z_{i+1})^2 + K'(s^z_i+s^z_{i+1}+s^z_{i+2})^2\right)} \prod_i \delta_{s_i,s''_i}\\
&= \mathrm{e}^{-\beta\sum_i\left(\frac{K_x}{2}(s^z_i+s^z_{i+1})^2 + K'(s^z_i+s^z_{i+1}+s^z_{i+2})^2\right)} && (3.9)\\
T^{s''_1,\dots,s''_N}_{1ys'_1,\dots,s'_N} &= \mathrm{e}^{-\beta\sum_i\left(\frac{K_y}{2}(s^z_i+{s'}^z_i)^2\right)}\\
&= \prod_{i=1}^{N/2}\left(1+\mathrm{e}^{-\beta K_y}(s^+_{2i-1}s^-_{2i} + s^-_{2i-1}s^+_{2i})\right)\\
T^{s''_1,\dots,s''_N}_{2ys'_1,\dots,s'_N} &= \prod_{i=1}^{N/2}\left(1+\mathrm{e}^{-\beta K_y}(s^+_{2i}s^-_{2i+1} + s^-_{2i}s^+_{2i+1})\right). && (3.10)
\end{aligned}
$$

Записавши повну трансфер-матрицю в наближенні одного перекиду, можна отримати гамільтоніан квантової моделі з zz взаємодією між наступними після найближчих сусідами [6]:

$$
H_q = \sum_{i=1}^{N} J^z s^z_i s^z_{i+1} + J^z_2 s^z_i s^z_{i+2} + J^{xx}(s^x_i s^x_{i+1} + s^y_i s^y_{i+1}), \tag{3.11}
$$

де $J^z = 2\beta(K_x + 2K')$, $J^z_2 = 2\beta K'$, $J^{xx} = -2\mathrm{e}^{-\beta K_y}$. Цей гамільтоніан описує фрустрований квантовий ланцюжок з конкуруючою zz взаємодією між найблжчими і наступними після найближчих сусідами. В залежності від значень параметрів така система може перебувати в антиферомагнітній, димерній фазах та у фазі спінової рідини, що відповідає гладкій, невпорядкованій гладкій та шорсткій фазі поверхні [9].

4. Двосортна BCSOS модель та її застосування до опису поверхонь іонних кристалів та поверхні GaAs

Іонні кристали є яскравим прикладом систем з двосортною поверхнею. Для них часто характерна об'ємоцентрована кубічна гратка з атомами одного сорту на межі елементарної комірки і атомом іншого сорту в центрі. Поверхня [100] такого матеріалу відповідатиме двосортній BCSOS моделі. Така поверхня поділена на дві підгратки A та B, енергії різниць висот для атомів сортів A та B буде різною, K_A та K_B відповідно. Описана модель відповідає знакозмінній шестивершинній моделі [11–13], а також може бути зображена моделлю Ашкіна-Телера [11]. З іншого боку, як і в попередніх параграфах, цю модель можна звести до задачі на основний стан квантової спінової моделі. Для цього зауважимо, що двосортній BCSOS моделі відповідає така модель Ізінга

$$\begin{aligned} H = \frac{1}{2}\sum_{i,j} & K_A\left((s^z_{2i-1,2j-1}+s^z_{2i,2j-1})^2+(s^z_{2i-1,2j}+s^z_{2i,2j})^2\right) \\ & +K_B\left((s^z_{2i-1,2j-1}+s^z_{2i-1,2j})^2+(s^z_{2i,2j-1}+s^z_{2i,2j})^2\right) \\ & +K_B\left((s^z_{2i,2j}+s^z_{2i+1,2j})^2+(s^z_{2i,2j+1}+s^z_{2i+1,2j+1})^2\right) \\ & +K_A\left((s^z_{2i,2j}+s^z_{2i,2j+1})^2+(s^z_{2i+1,2j}+s^z_{2i+1,2j+1})^2\right). \end{aligned} \tag{4.1}$$

Процедура знаходження трансфер-матриці, описана вище, легко узагальнюється і на цей випадок. Так, трансфер-матриці T_1, T_2 матитуть такий вигляд:

$$\begin{aligned} T_1 &= \prod_{i=1}^{N/2} \mathrm{e}^{-2\beta K_A(s^z_{2i-1}s^z_{2i}+\frac{1}{4})}\left(1+\mathrm{e}^{-\beta K_B}(s^+_{2i-1}s^-_{2i}+s^-_{2i-1}s^+_{2i})\right) \\ T_2 &= \prod_{i=1}^{N/2} \mathrm{e}^{-2\beta K_B(s^z_{2i}s^z_{2i+1}+\frac{1}{4})}\left(1+\mathrm{e}^{-\beta K_A}(s^+_{2i}s^-_{2i+1}+s^-_{2i}s^+_{2i+1})\right). \end{aligned} \tag{4.2}$$

Квантовий гамільтоніан, який відповідає трансфер-матриці $T = T_1T_2$ в наближенні одного перекиду матиме вигляд:

$$\begin{aligned} H_q = \sum_{i=1}^{N/2} & J^z_A s^z_{2i-1}s^z_{2i} + J^z_B s^z_{2i}s^z_{2i+1} \\ & +J^{xx}_B(s^x_{2i-1}s^x_{2i}+s^y_{2i-1}s^y_{2i}) + J^{xx}_A(s^x_{2i}s^x_{2i+1}+s^y_{2i}s^y_{2i+1}), \end{aligned} \tag{4.3}$$

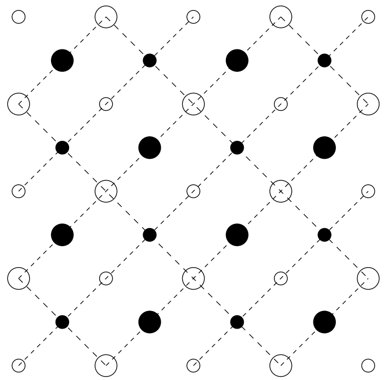

Рис. 2. Поверхня [001] сполуки GaAs. Темні (світлі) кружечки позначають атоми Ga (As). Менші (більші) символи відповідають першому (другому) шару. Лініями з'єднано сусідні атоми.

де $J^z_{A,B} = 2\beta K_{A,B}$, $J^{xx}_{A,B} = -2\mathrm{e}^{-\beta K_{A,B}}$. Гамільтоніан (4.3) описує періодичний XXZ ланцюжок з періодом 2. Відомо, що двосортна BCSOS модель зазнає фазового переходу скінченного порядку [11]. Отже, і у відповідній їй спіновій моделі (4.3) також повинен існувати такий фазовий перехід в основному стані, проте аналіз цієї моделі потребує додаткового розгляду. З загальних міркувань можна стверджувати, що квантовий гамільтоніан (4.3), може описати реконструйовану поверхню 2×2, у випадку низьких температур ($\beta \gg 1$) та різних знаків енергій взаємодій K_A та K_B.

Серед двокомпонентних сполук, особливе місце посідає GaAs, поверхня якого виявляє цілий ряд фазових перетворень під впливом температуру і інших зовнішніх умов [14]. Сполука GaAs кристалізується у кубічну структуру цинкової обманки, яку можна уявити як гранецентровану гратку галію з іншою гранецентрованою граткою миш'яку зміщену на $\sqrt{3}/4$ сталої гратки у напрямку [111] [14]. Два шари Ga та As поверхні [001] зображено на рис. 2. З рис. 2 видно, що просторово найближчими один до одного є атоми різних сортів, крім того їх положення одне відносно одного є однозначним. Натомість наступні сусіди будуть атомами одного сорту і на поверхні [001] різниця висот між ними буде $\pm a/2$, де a — стала гратки. Цей факт дозволяє розглядати поверхні збагачені Ga або As як ефективну BCSOS модель поверхні. В першому випадку параметром взаємодії буде ефективна енергія зв'язку двох атомів As, а в іншому випадку

Ga. Очевидно також, що для опису впорядкування та шорсткування на поверхні сполуки GaAs з проміжними концентраціями обох компонент необхідно вийти за межі BCSOS моделі і розглянути її узагальнення.

5. Висновки

В роботі розглянуто узагальнення BCSOS моделі поверхні на випадок взаємодій дальших за найближчі сусіди та двосортної поверхні. BCSOS модель поверхні представлено моделлю Ізінга з умовою шестивершинної моделі, яку записано явно. У випадку врахування дальших взаємодій було знайдено трансфер-матрицю в операторній формі, а також гамільтоніан квантової моделі, який їй відповідає в наближенні одного перекиду. Вихід за межі взаємодій між найближчими сусідами може призводити до виникнення у квантовому ланцюжку, який відповідає BCSOS моделі, конкуруючих взаємодій, а також нових фаз. Дослідження двосортної BCSOS моделі може бути зведено до періодичного квантового XXZ ланцюжка з періодом 2 та допускає опис реконструйованої фази поверхні. Розглянута модель поверхні GaAs передбачає її зображення звичайною BCSOS моделлю у випадку збагачення Ga або As.

Література

1. A.Groß, Theoretical Surface Science: A Microscopic Perspective. (Springer 2002).
2. Х. ван Бейрен, И.Нольден, Переход огрубления, УФН **161**, 133 (1991).
3. J. D. Weeks, The roughening transition, in Ordering in Strongly Fluctuating Condensed Matter Systems, edited by T. Riste (Plenum, New York, 1980).
4. M. Bernasconi, E. Tosatti, Reconstruction, disordering and roughening of metal surfaces, Surf. Sci. Rep. **17**, 363 (1993).
5. M. den Nijs, K. Rommelse, Preroughening transitions in crystal surfaces and valence-bond phases in quantum spin chains, Phys. Rev. B **40**, 4709 (1989).
6. 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 **49**, 13886 (1994).
7. H. van Beijeren, Exactly Solvable Model for the Roughening Transition of a Crystal Surface, Phys. Rev. Lett. **38**, 993 (1977).

8. Ю.А. Изюмов, Ю.Н. Скрябин, Статистическая механика магнитоупорядоченных систем, М.:Наука, 1987.
9. О. Забуранний, Дискретні моделі поверхні та їхні квантові спінові відповідники, Журнал фізичних досліджень **10**, 98 (2006).
10. P. J. M. Bastiaansen, H. J. F. Knops, Roughening and preroughening in the six-vertex model with an extended range of interaction, Phys. Rev. B **53**, 126 (1996).
11. H. J. F. Knops, Roughening transitions of finite order, Phys. Rev. B **20**, 4670 (1979).
12. G. Mazzeo, E. Carlon, H. van Beijeren, Phase Diagram of the Two Component Body-Centered Solid-on-Solid Model, Phys. Rev. Lett. **74**, 1391 (1995).
13. E. Carlon, G. Mazzeo, H. van Beijeren, Transfer-matrix study of the staggered body-centered solid-on-solid model, Phys. Rev. B 55, **757** (1997).
14. G. Wastlbauer, J. A. C. Bland, Structural and magnetic properties of ultrathin epitaxial Fe films on GaAs(001) and related semiconductor substrates, Advances in Physics, **54**, 137 (2005).
15. M. Takahashi, *Thermodynamics of One-Dimensional Solvable Models* (Cambridge University Press, 1999).

CONDENSED MATTER PHYSICS

The journal **Condensed Matter Physics** is founded in 1993 and published by Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine.

AIMS AND SCOPE: The journal **Condensed Matter Physics** contains research and review articles in the field of statistical mechanics and condensed matter theory. The main attention is paid to physics of solid, liquid and amorphous systems, phase equilibria and phase transitions, thermal, structural, electric, magnetic and optical properties of condensed matter. Condensed Matter Physics is published quarterly.

ABSTRACTED/INDEXED IN:

- Chemical Abstract Service, Current Contents/Physical, Chemical&Earth Sciences
- ISI Science Citation Index-Expanded, ISI Alrting Services
- INSPEC
- Elsevier Bibliographic Databases (EMBASE, EMNursing, Compendex, GEOBASE, Scopus)
- "Referativnyi Zhurnal"
- "Dzherelo"

CONTACT INFORMATION:
Institute for Condensed Matter Physics
of the National Academy of Sciences of Ukraine
1 Svientsitskii Str., 79011 Lviv, Ukraine
Tel: +38(032)2760908; Fax: +38(032)2761978
E-mail: cmp@icmp.lviv.ua   http://www.icmp.lviv.ua