

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ІНСТИТУТ ФІЗИКИ КОНДЕНСОВАНИХ СИСТЕМ

На правах рукопису

ДАНИЛІВ Олег Дмитрович

УДК 538.935, 538.956

**ТЕРМОДИНАМІКА ДВОПІДГРАТКОВОЇ
ПСЕВДОСПІН-ЕЛЕКТРОННОЇ МОДЕЛІ В ТЕОРІЇ
СИЛЬНОКОРЕЛЬОВАНИХ ЕЛЕКТРОННИХ СИСТЕМ**

01.04.02 – теоретична фізика

А В Т О Р Е Ф Е Р А Т

дисертації на здобуття наукового ступеня
кандидата фізико-математичних наук

ЛЬВІВ – 2000

Дисертацією є рукопис

Роботу виконано в Інституті фізики конденсованих систем Національної академії наук України.

- Науковий керівник – член-кореспондент НАН України, доктор фізико-математичних наук, професор **Стасюк Ігор Васильович**, Інститут фізики конденсованих систем НАН України, м. Львів, завідувач відділу квантової статистики.
- Офіційні опоненти – доктор фізико-математичних наук, професор **Дідух Леонід Дмитрович**, Тернопільський державний технічний інститут ім. І. Пулюя, завідувач кафедри фізики.
- доктор фізико-математичних наук, професор **Ваврух Маркіян Васильович**, Львівський національний університет ім. І. Франка, завідувач кафедри астрофізики.
- Провідна організація – Інститут теоретичної фізики ім. М.М.Боголюбова НАН України, м. Київ, відділ нелінійної фізики конденсованих систем.

Захист відбудеться “___” _____ 2000 року о “_____” на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 35.156.01 при Інституті фізики конденсованих систем Національної академії наук України за адресою: 79011 м. Львів, вул. Свенціцького, 1.

З дисертацією можна ознайомитись у науковій бібліотеці Інституту фізики конденсованих систем НАН України за адресою: 79026 м. Львів, вул. Козельницька, 4.

Автореферат розіслано “___” _____ 2000 року.

Вчений секретар
спеціалізованої вченої ради Д 35.156.01,
кандидат фіз.-мат. наук

Т.Є. Крохмальський

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми. Моделі з сильною кореляцією носіїв заряду є базовими в теорії магнетизму та при описі переходів метал-діелектрик у сполуках з перехідними та рідкісноземельними елементами. Починаючи з 60-х років вони детально вивчались, для їх опису було запропоновано багато підходів та наближень. Відкриття в 1986 році явища високотемпературної надпровідності в сполуках $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_4$, а потім інших шаруватих мідно-оксидних високотемпературних надпровідниках (ВТНП) поставило задачу опису багатьох властивостей даних матеріалів (високе значення T_c , антиферромагнетизм, перехід в діелектричну фазу, структурні фазові переходи, фазове розшарування) і дало нове життя моделям з сильною кореляцією на вузлі. Яскраво виражена двовимірність та специфічна електронна структура ВТНП - наявність майже локалізованих $3d-2p$ валентних електронів в надпровідних площинах - стала причиною того, що основу моделей, запропонованих для їх опису, складають 2D модель Хаббарда, $t-J$ модель, модель Емері.

Важливою характеристикою кисневих ВТНП є наявність вершинного кисню O4. Численні експерименти з розсіяння рентгенівських променів, комбінаційного розсіяння, дослідження EXAFS та ін. вказали на існування сильно вираженого ангармонізму в коливаннях O4 вздовж осі c . Однак, до цього часу немає повного розуміння ролі апексного кисню. Для аналізу впливу локального ангармонізму на електронну структуру та фізичні властивості ВТНП сполук використовуються моделі, які базуються на врахуванні кореляцій хаббардівського типу при одночасному включенні взаємодії електронів з ангармонічними ступенями вільності. До числа таких моделей відноситься псевдоспін-електронна модель (ПЕМ) - для опису руху частинок у двомінімумних потенціальних ямах використовується псевдоспіновий формалізм (значення $S_i^z = \pm \frac{1}{2}$ відповідають двом рівноважним положенням іона O4). Для опису взаємодії з носіями заряду вводиться член типу $g\kappa_i S_i^z$, де κ_i - оператор кількості електронів (дірок).

В рамках ПЕМ на основі кластерних розрахунків та за допомогою числового моделювання методом Монте-Карло проводились дослідження ефективних електронних кореляцій та надпровідних спарювань. Псевдоспін-електронна взаємодія, як було встановлено, приводить до розщеплень в спектрі, викликаючи появу додаткових підзон і порушуючи електрон-діркову симетрію задачі. Була виявлена можливість зміни знаку інтеграла ефективного електронного обміну в залежності від стану системи псевдоспінів (їх взаємних орієнтацій). Розрахунки поперечної діелектричної сприйнятливості моделі (сприйнятливості в напрямку, перпендикулярному до площин провідності) в наближенні Хаббард-I та в узагальненому наближенні хаотичних фаз (Stasyuk I.V., Shvaika A.M. //Acta Physica Polonica A, 1993, **84**, №2, 293-313; Physica C, 1994, **235-**

240, 2173-2174) показали можливість виникнення, при певних умовах, діелектричних нестійкостей (як на краю, так і в центрі зони Бріллюена), зумовлених непрямою взаємодією між псевдоспінами через електрони провідності. Ці нестійкості можуть стимулювати перехід у надпровідний стан. Розрахунки, проведені в наближенні середнього поля показали, що додаткове внесення в модель далекосяжної псевдоспін-псевдоспінової взаємодії може приводити до впорядкування псевдоспінів і появи сегнетоелектричної фази.

Дана робота присвячена більш детальному розгляду згаданих псевдоспін-електронних взаємодій. Досліджується їх поведінка при зміні параметрів теорії, вивчається їх вплив на рівноважний стан та термодинамічні характеристики системи. Для опису можливих сегнетоелектричних нестійкостей у надпровідниках типу YBaCuO, запропоновано двопідграткову псевдоспін-електронну модель, що враховує особливості будови елементарної комірки та центральносиметричність кристалічної структури. Шляхом розрахунку термодинамічних функцій та дослідження умов рівноваги у різних термодинамічних режимах ($\mu = const$ та $n = const$) вивчаються умови, при яких псевдоспін-електронна взаємодія приводить до появи неоднорідних фазово розшарованих станів. Псевдоспін-псевдоспінова взаємодія розглядається в наближенні середнього поля, а також в однопетловому наближенні. Для врахування впливу електронного переносу та електронних кореляцій застосовано самоузгоджену схему узагальненого наближення хаотичних фаз.

Дисертаційна робота виконана в Інституті фізики конденсованих систем НАН України згідно планам робіт за темами: № 0194O22986 "Дослідження ефектів зумовлених локальним ангармонізмом та короткодіючою взаємодією квантових полів різної природи, в кристалічних, неупорядкованих і молекулярних системах", № 0199U00670 "Термодинаміка та кінетика псевдоспін-ферміонних моделей локально-ангармонічних кристалічних і молекулярних систем з сильними хаббардівськими кореляціями".

Мета і задачі дослідження. Метою роботи є дослідження термодинаміки псевдоспін-електронної моделі в різних наближеннях, зокрема:

- визначення ролі електронного переносу у формуванні ефективних взаємодій в псевдоспін-електронній моделі з сильною кореляцією електронів на вузлі, дослідження фазових переходів, зумовлених такими взаємодіями;
- формулювання двопідграткової псевдоспін-електронної моделі, що більш повно відтворює реальну будову високотемпературних надпровідників типу YBaCuO; дослідження в рамках моделі як нестабільностей сегнетоелектричного типу так і впливу граткових ангармонізмів на появу фазово-розшарованих станів;

- розвиток в рамках узагальненого наближення хаотичних фаз (УНХФ) самоузгодженої схеми обчислення вільної енергії та основних термодинамічних функцій для моделей з сильними одновузловими електронними взаємодіями;
- побудова фазових діаграм та розрахунків термодинамічних функцій двопідграткової моделі при врахуванні далекосяжної псевдоспін-псевдоспінової взаємодії та переносу електронів.

Наукова новизна одержаних результатів: В рамках теорії збурень за електронним переносом вперше отримано ефективний гамільтоніан для псевдоспін-електронної моделі, який описує взаємодію між електронами на сусідніх вузлах ґратки залежну від орієнтації та динаміки псевдоспінів. Показано, що дана взаємодія приводить до виникнення зарядовпорядкованого стану з модуляцією електронної концентрації та структури кристалу (середнього значення псевдоспіну), яка характеризується подвоєнням періоду ґратки. Встановлено умови появи зарядовпорядкованої фази. У наближенні середнього поля при точному врахуванні одновузлових кореляцій знайдено температуру відповідного фазового переходу, досліджено її залежність від електронної концентрації та параметрів моделі. Виявлено можливість фазового розшарування, викликаного даною взаємодією.

Для дослідження нестійкостей сегнетоелектричного типу запропоновано двопідграткову псевдоспін-електронну модель, у якій враховано симетрію та структуру реальних об'єктів типу високотемпературних надпровідників. У наближенні невзаємодіючих кластерів (при точному врахуванні міжплощинної взаємодії в межах одновузлового кластера) досліджено особливості низькотемпературної поведінки діелектричної сприйнятливості χ_{\perp} моделі; встановлено умови, при яких для фіксованого значення хімічного потенціалу електронів ($\mu = const$) вона описується законом Кюрі. Проаналізовано внески електронної та псевдоспінової підсистем у формуванні ефективного дипольного моменту кластера.

В наближенні середнього поля та однопетловому наближенні встановлено для двопідграткової ПЕМ області існування сегнетофази, побудовано (T, h) -діаграми у режимах $\mu = const$ та $n = const$. Досліджено топологію фазових діаграм при скінченному радіусі далекосяжної взаємодії. Показано, що при фіксованій середній концентрації електронів залежно від значень n та поля асиметрії одноіонного потенціалу h виникає фазове розшарування на області з різною концентрацією та поляризацією $\eta = \langle S_1^Z + S_2^Z \rangle$. На цій основі вперше дано пояснення сегнетоелектричних аномалій та неоднорідностей структури у ВТНП.

Запропоновано самоузгоджену схему розрахунку середніх чисел заповнення та термодинамічних функцій в рамках УНХФ для моделей з сильною електронною кореляцією хаббардівського типу. Шляхом підсумовування однопетлевих фрагментів діаграм, отримано

систему трансцендентних рівнянь, що поєднує рівняння для власно-енергетичної та т.зв. “кінцевої” частини електронної функції Гріна.

В рамках даної схеми вперше досліджено для двопідграткової ПЕМ роль електронного переносу (поряд з прямою взаємодією між псевдоспінами) у фазових переходах з появою впорядкування псевдоспінів та стрибкоподібною зміною n . Показано, що в точці фазового переходу має місце перебудова електронного спектру, розщепленого на підзони під впливом псевдоспін-електронної взаємодії. Фазове розшарування в цьому випадку відбувається при умові знаходження хімпотенціалу в межах однієї з підзон.

Практичне і наукове значення одержаних результатів. Проведені теоретичні дослідження виявили можливість появи нестабільностей сегнетоелектричного типу у високотемпературних надпровідниках, що може служити одним з додаткових факторів, які впливають на появу надпровідного стану. Отримані в роботі результати по фазовому розшаруванню можуть бути використані при подальшому дослідженні неоднорідних станів у високотемпературних надпровідниках.

Схема розрахунку вільної енергії та середніх від операторів Хаббарда в самоузгодженому підході узагальненого наближення хаотичних фаз дає можливість проводити аналіз фазових переходів не тільки на основі пошуку точок сингулярностей кореляційних функцій, але й шляхом повного аналізу термодинамічно стійких рівноважних станів систем з сильними електронними кореляціями. Запропонована в роботі схема сумування діаграм може служити допоміжним етапом для розв'язку одновузлової задачі в методі динамічного середнього поля для нескінченної розмірності простору.

Особистий внесок здобувача. Автор приймав безпосередню участь у виведенні ефективного гамільтоніану для псевдоспін-електронної моделі. Особисто автором отримані рівняння для температури фазового переходу в зарядовпорядкований стан, проведено аналіз поведінки поперечної діелектричної сприйнятливості у випадку відсутності переносу та далекодіючої псевдоспін-псевдоспінової взаємодії. Автором дано узагальнення псевдоспін-електронної моделі на двопідгратковий випадок. Автор проводив числові розрахунки, необхідні для побудови фазових діаграм у всіх застосованих наближеннях. Автором запропонований спосіб розрахунку вільної енергії в рамках самоузгодженої схеми УНХФ.

Апробація роботи. Основні результати дисертації доповідались і обговорювались на таких конференціях: Міжнародна амперівська школа з магнітного резонансу та мікрохвильового поглинання у високотемпературних надпровідних матеріалах (Познань, Польща, 1994р.); Міжнародна конференція з магнетизму (Варшава, Польща, 1994р.); 2-й міжнародний симпозіум "Високотемпературна надпровідність та тунельні явища" (Слав'яногірськ, 1994р.); 5-й всесвітній конгрес з надпровідності (Будапешт, Угорщина, 1996р.); XXII міжнародна школа та III Польсько-

Українська нарада з фізики сегнетоелектриків (Кудова-Здруй, Польща, 1996 р.); Міжнародна робоча нарада "Фізика конденсованого стану" INTAS-Україна (Львів, 1998 р.); 11-а загальна конференція Європейського фізичного товариства (Лондон, Великобританія, 1999 р.); 18-а конференція Європейського фізичного товариства з фізики конденсованих систем (Монтре, Швейцарія, 2000 р.); а також на семінарах Інституту фізики конденсованих систем Національної академії наук України та на семінарах відділу квантової статистики цього інституту.

Публікації. За матеріалами дисертації опубліковано 15 робіт, в тому числі 5 статей в наукових журналах (4 в реферованих журналах), 2 препринти та 8 тез конференцій. Перелік основних публікацій подано в кінці автореферату.

Структура та об'єм дисертації. Дисертаційна робота складається із вступу, чотирьох розділів, висновків, списку використаних джерел; кожний розділ дисертації починається зі вступу та завершується висновками. Робота викладена на 111 сторінках (разом з літературою – 127 сторінок), включає бібліографічний список, що містить 126 найменувань у вітчизняних та закордонних виданнях.

ЗМІСТ РОБОТИ

У **вступі** обгрунтовано актуальність досліджень, викладених у дисертації, сформульовано мету роботи, відзначено її наукову новизну.

У **першому розділі** подано короткий огляд основних результатів експериментальних і теоретичних досліджень високотемпературних надпровідників, які покладені в основу розглядуваної псевдоспін-електронної моделі. Викладено деякі аспекти досліджень моделі Хаббарда - однієї з базових моделей ВТНП, а також результати досліджень псевдоспін-електронної моделі. Обгрунтовується вибір підходів для подальших розрахунків.

Другий розділ містить дослідження ролі електрон-псевдоспінової взаємодії у формуванні ефективної взаємодії між електронами на прикладі однопідграткової псевдоспін-електронної моделі; дається опис переходу до зарядовпорядкованого стану під впливом даної взаємодії.

Гамільтоніан псевдоспін-електронної моделі має вигляд

$$H = \sum_i H_i + \sum_{ij\sigma} t_{ij} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma}, \quad (1)$$

$$H_i = U n_i^\uparrow n_i^\downarrow - \mu (n_i^\uparrow + n_i^\downarrow) + g (n_i^\uparrow + n_i^\downarrow) \hat{S}_i^Z - \Omega S_i^x - h S_i^Z, \quad (2)$$

де поруч з хаббардівською кореляцією (U) враховано однувузлову псевдоспін-електронну взаємодію $g (n_i^\uparrow + n_i^\downarrow) \hat{S}_i^Z$, тунельне розщеплення найнижчих коливних станів ΩS_i^x і асиметрію ан-

гармонічного локального потенціалу hS_i^Z . За нульове наближення вибирається одновузлова частина гамільтоніана (2), на якій вводиться базис восьми станів $|i, R\rangle = |n_i^\uparrow, n_i^\downarrow, S_i^Z\rangle$:

$$\begin{aligned} |1\rangle &= |0,0,\uparrow\rangle, & |2\rangle &= |1,1,\uparrow\rangle, & |3\rangle &= |0,1,\uparrow\rangle, & |4\rangle &= |1,0,\uparrow\rangle, \\ |\tilde{1}\rangle &= |0,0,\downarrow\rangle, & |\tilde{2}\rangle &= |1,1,\downarrow\rangle, & |\tilde{3}\rangle &= |0,1,\downarrow\rangle, & |\tilde{4}\rangle &= |1,0,\downarrow\rangle. \end{aligned}$$

На цьому базисі використовується формалізм операторів Хаббарда X_i^{RS} , означених як $X_i^{RS} = |i, R\rangle\langle i, S|$. Шляхом застосування до гамільтоніану (2) послідовно унітарного перетворення типу повороту (що діагоналізує одновузлову частину H_i) та теорії збурень в операторній формі за переносом (аналогічно до методу, який застосовується при переході від моделі Хаббарда до t - J моделі), отримано в границі $U \rightarrow \infty$ ефективний гамільтоніан, який в термінах електронних та псевдоспінових операторів має вигляд

$$H_{\text{eff}} = \sum_{ij} t_{ij}^2 (1 - n_i) n_j \left[a'(S_i^Z + S_j^Z) + b'(S_i^Z - S_j^Z) + 2c'S_j^X + 2d'S_i^X \right], \quad (3)$$

де коефіцієнти a' , b' , c' та d' – складні функції параметрів моделі. При $\Omega \rightarrow 0$

$$a' \cong \begin{cases} 0, & h < g \\ -1/g, & 0 < h < g, \\ 0, & h < 0 \end{cases}, \quad b' \cong \begin{cases} 1/g, & h < g \\ 0, & 0 < h < g, \\ -1/g, & h < 0 \end{cases}, \quad c' \cong 0, \quad d' \cong 0 \quad (4)$$

Оператор H_{eff} має немагнітну природу і описує ефективну взаємодію між електронами на сусідніх вузлах ґратки, що залежить від конфігурації псевдоспінів. З другого боку, на псевдоспін діє поле, яке формується заповненням електронних станів у найближчому оточенні і залежить також від заповнення електронами виділеного вузла. Умовою придатності даної теорії є нерівність $g \gg t_{ij}$ - константа псевдоспін-електронної взаємодія багато більша від інтеграла переносу.

Розгляд ефективної взаємодії проведено у наближенні середнього поля при точному врахуванні одновузлових кореляцій. Рівняння самоузгодження отримано з врахуванням електронного переносу та зумовлених ним розщеплень в одноелектронному спектрі (на рівні $4\uparrow$, $\tilde{4}\tilde{\uparrow}$, $\tilde{4}\downarrow$ та $4\tilde{\downarrow}$ для $\sigma = \uparrow$, та подібно для $\sigma = \downarrow$). За допомогою лінеаризації отриманих рівнянь по параметру $\delta n_i = n_i - n$, який характеризує відхилення концентрації від її середнього значення, показано, що система стає нестійкою щодо утворення зарядовпорядкованого стану в області значень $0 \leq h \leq g$. Температура нестійкості $\Theta_c(\vec{k})$ приймає при цьому максимальне значення при векторі модуляції $\vec{k}^* = \left(\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\right)$, де a – стала ґратки. Модуляція електронної концентрації супроводжується модуляцією поляризації, що описується параметром $\langle S_i^Z \rangle$. В області низьких тем-

ператур та при великих, або малих значеннях концентрації ($1-n \ll 1$, $n \ll 1$), з рівняння для Θ_c в першому порядку по $\xi_o = \sum_j t_{ij}^2$ впливає вираз

$$\Theta_c = -2a'n(1-n)\xi_o \underset{\Omega \rightarrow 0}{=} \begin{cases} \frac{2n(1-n)}{g} \xi_o, & \text{при } 0 < h < g; \\ 0, & \text{в інших випадках.} \end{cases} \quad (5)$$

Даний результат узгоджується у вказаній області з результатами для температури нестійкості, отриманими в наближенні УНХФ для даної моделі (Stasyuk I.V., Shvaika A.M. and Danyliv O.D. //Molecular Physics Reports, 1995, **9**, 61-75.).

Рис.1 ілюструє неоднозначну залежність температури фазового переходу від h поблизу точок $h=0$ та $h=g$ при точному розв'язку рівняння для Θ_c , що свідчить про можливість існування зарядовпорядкованої фази як проміжної в певному інтервалі температур і поля h . Досліджено вплив параметра тунелювання на Θ_c : при збільшенні Ω , завдяки зростанню взаємодії між рівнями ($4\tilde{I}$) та ($\tilde{4}1$), температура переходу в модульований стан зростає, за яким слідує спадання. Показано, що відмінне від нуля значення Ω розширює область значень h , при яких настає зарядове впорядкування.

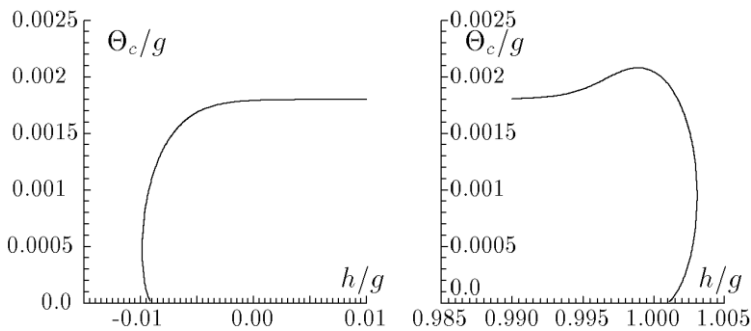


Рис. 1 Фазова $h-\Theta$ діаграма переходу з однорідного в зарядовпорядкований стан. Значення параметрів: $\Omega = 0$, $t_{ij} = 0.05g$, $n = 0.9$.

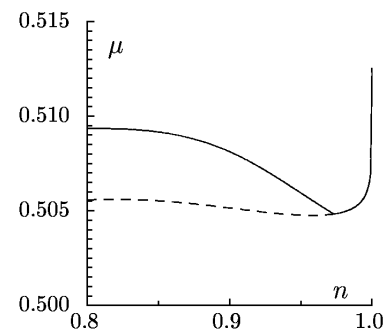


Рис. 2 Залежність хімічного потенціалу від середньої концентрації ($h=1.001g$, $T=0.008g$, $\Omega=0$, $n=0.9$, $t_{ij}=0.05g$). Пунктирна крива – метастабільний стан.

Виявлено характерну поведінку хімічного потенціалу (Рис. 2) – неоднозначна залежність $n(\mu)$ вказує на можливість фазового розшарування в системі. Це питання більш детально розглядається в четвертому розділі роботи.

Третій розділ присвячено дослідженню нестабільностей сегнетоелектричного типу та неоднорідних (фазово-розшарованих) станів, які можуть існувати в двопідгратковій ПЕМ завдяки прямій псевдоспін-псевдоспіновій взаємодії.

Узагальнення ПЕМ на двопідгратковий випадок запропоновано з метою уникнення ненульового значення поляризації при будь-якій температурі та більш повного відтворення центрально-носиметричної структури кристалічної ґратки при застосуванні моделі до ВТНП типу YBaCuO:

$$H = H_e + H_s + H_{e-s} + H_{s-s}, \quad (6)$$

$$H_e = U \sum_i (n_{i1}^\uparrow n_{i1}^\downarrow + n_{i2}^\uparrow n_{i2}^\downarrow) - \mu \sum_{i,s} (n_{i1}^s + n_{i2}^s) + \sum_{ij} \sum_{s\alpha} t_{ij} a_{is\alpha}^+ a_{js\alpha}, \quad H_{e-s} = g \sum_{is} (n_{i1}^s S_{i1}^z - n_{i2}^s S_{i2}^z),$$

$$H_s = -h \sum_i (S_{i1}^z - S_{i2}^z) - \Omega \sum_i (S_{i1}^x + S_{i2}^x), \quad H_{s-s} = -J \sum_i S_{i1}^z S_{i2}^z - \frac{1}{2} \sum_{ij} \sum_{\alpha\beta} J_{ij}^{\alpha\beta} S_{i\alpha}^z S_{j\beta}^z.$$

Тут H_e - хаббардівський гамільтоніан, перенос здійснюється лише в підґратках (що у випадку структур типу YBaCuO відповідають надпровідним площинам), $H_s + H_{s-s}$ - псевдоспінова частина гамільтоніану, причому внутрішнє поле h діє на підґратки в протилежних напрямках ($S_{i\alpha}^z$ - оператор псевдоспіну, який співставляється ангармонічному елементу структури, що належить до i -ї комірки та підґратки $\alpha=1,2$). Взаємодію $J S_{i1}^z S_{i2}^z$ в межах кластера (у випадку YBaCuO – це структурний елемент Cu2-04-04-Cu2) виділено окремо. При $J=0$ псевдоспінова частина гамільтоніану відповідає моделі Міцуї. Для опису можливого впливу резервуару електронів, що пов'язаний з іншими елементами структури кристалу, не врахованими явно, модель досліджується в двох різних режимах: $\mu = const$ та $n = const$. Модель розглянуто на базисі станів, який є прямим добутком однопідграткових базисів. Подальший розгляд у даному розділі проведено при виключенні електронного переносу ($t_{ij}=0$).

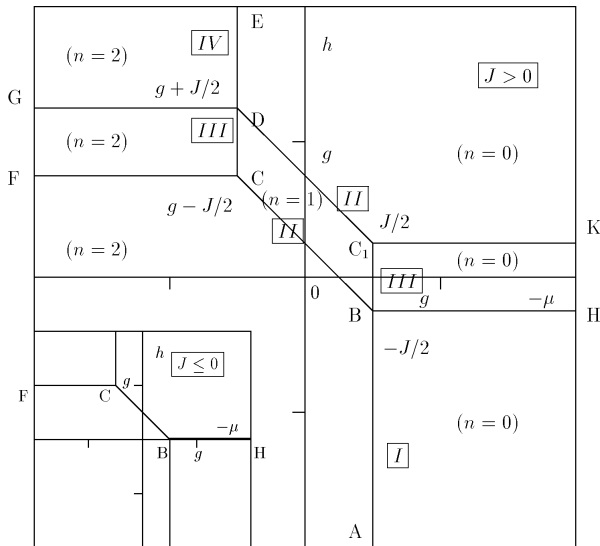


Рис. 3 Діаграма основного стану двопідграткової ПЕМ при відсутності взаємодії між кластерами. В дужках показано середню концентрацію електронів. Лінії відділяють різні стани.

Розв'язано квантово-механічну секулярну задачу у випадку відсутності взаємодії між кластерами. Для низьких температур отримано поведінку поперечної діелектричної сприйнятливості $\chi_{\perp}(T)$, яка розраховувалась як похідна вектора поляризації $P_i^z = d_s (S_{i1}^z + S_{i2}^z) + d_e (n_{i1} - n_{i2})$ по зовнішньому полю вздовж осі z . Враховано, що дипольний момент в напрямку нормалі до площин складається з двох доданків, які відповідають різним процесам в системі – перевертоту псевдоспіну (дипольний момент d_s) та переходу електрона з однієї підґратки в іншу (d_e). Основний стан при $J>0$ є виродженим в смузі KHBCFGDC_1 , зображений на діаграмі

основного стану (рис. 3) і, відповідно, у цій області виявлено закон $1/T$ для χ_{\perp} . Поза смугою для T сприйнятливості отримано експоненційно спадну поведінку ($\chi_{\perp} \sim \frac{C}{T} e^{-\frac{g}{2T}}$). Вплив тунельного розщеплення Ω є суттєвим при $\mu = const$, коли воно знімає виродження основного стану (області GDCF та C_1 KHB). В цьому випадку закон Кюрі змінюється на насичення ($\chi_{\perp} \sim \frac{CJ}{\Omega^2}$). В режимі $n=const$ і при $T \rightarrow 0$ хімічний потенціал при зміні h проходить між станами з різними значеннями n (області I - IV на Рис.3). Тому при $\Omega \neq 0$ основний стан залишається виродженим; вплив тунельного розщеплення не призводить до зміни поведінки $\chi_{\perp}(T)$ в області низьких температур. Зокрема, для областей I, II маємо

$$\chi_{\perp}(0 < n < 1) = \frac{\beta}{v_c} \frac{(2-n)n}{2} d_e^2, \quad \chi_{\perp}(1 < n < 2) = \frac{\beta}{v_c} (2-n)(d_s - d_e)^2,$$

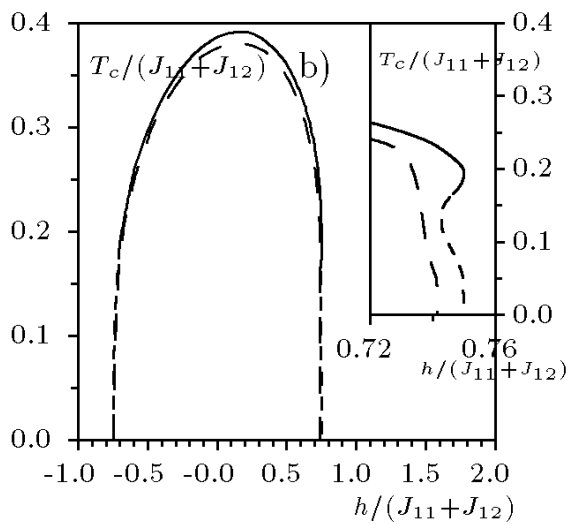


Рис. 4. Залежність температури сегнетоелектричного фазового переходу T_c від h в режимі $\mu = const$. Параметри: $J = g = -\mu = J_{11} + J_{12}$, $\frac{J_{11}-J_{12}}{J_{11}+J_{12}} = 0$. Фазові переходи можуть бути другого (суцільні лінії) або першого роду (штрихові лінії). Лінії з довгими штрихами відповідають однопетлевому наближенню з $R_c/a = 2$.

$n = const$ при різних значеннях параметрів моделі. Показано, що при $T=0$ сегнетофаза завжди присутня у вказаній області KHBFCGDC₁. Область сегнетовпорядкування зростає при зростанні

що вказує на відмінності у механізмі формувань ефективного дипольного моменту та різну роль псевдоспінової і електронної компонент при різних значеннях h .

Далекодійою псевдоспін-псевдоспінова взаємодія $J_{ij}^{\alpha\beta} S_{i\alpha}^Z S_{j\beta}^Z$ врахована в наближенні середнього поля а також в однопетлевому наближенні (в діаграмному підході це відповідає сумуванню внесків з однією сумою по хвильовому вектору та частоті), яке є виходом за рамки теорії середнього поля. Шляхом розв'язку рівнянь самоузгодження та дослідження на мінімум термодинамічного потенціалу (вільної енергії), побудовано фазові діаграми переходу у стан з впорядкуванням псевдоспінів в режимах $\mu = const$ та

міжпідграткової взаємодії J_{12} ($J_{\alpha\beta} = \sum_j J_{ij}^{\alpha\beta} > 0$). Якщо має місце лише псевдоспін-псевдоспінова взаємодія в межах підгратки, при $J \leq 0$ зона сегнетофази вироджується в лінію, яка є кривою переходів зі стрибком параметра $\xi = \langle S_1^Z - S_2^Z \rangle$, в той час як параметр порядку $\eta = \langle S_1^Z + S_2^Z \rangle$ рівний нулю. На основі однопетлевого наближення показано, що при скінченному радіусі далекосяжної взаємодії R_0 топологія фазових діаграм практично залишається незмінною. Має місце певне пониження T_c , можуть згладитись деякі ділянки кривої фазового переходу, що приводить, наприклад, до зникнення послідовності трьох фазових переходів (Рис. 4). У порівнянні з моделлю Міцуй, T - h діаграми ПЕМ є зміщеними по h і не є симетричними. Показано, що в режимі постійного значення концентрації виникає фазове розшарування на області з різними значеннями n та поляризації. Таким чином, область сегнетофази розширюється до границь області розшарування. Побудовано T - n та T - h діаграми з врахуванням процесів розшарування.

На основі результатів даного розділу дано пояснення спостережуваних нестабільностей сегнетоелектричного типу у ВТНП (Mihailovic D. and Heeger A.J., Solid State Comm, 1990, **75**, 319-323; Grachev A.I. and Pleshkov I.V. Solid State Comm., 1997, **101**, 507-512.)

Четвертий розділ присвячений дослідженню впливу електронного переносу на термодинамічні властивості двопідграткової ПЕМ. Розгляд проводиться на основі самоузгодженої схеми УНХФ (Izyumov Yu.A., Letfulov B.M. and Shipitsyn E.V. J. Phys.: Condens. Matter. 1994, **6**, 5137-5154.). В доповнення до розвинутого раніше підходу, запропоновано схему розбиття діаграм для одноелектронних функцій Гріна на ті, що вносять поправки до власно-енергетичної частини та діаграми, які дають вклад до кінцевої частини. Це дозволило вперше отримати вирази для термодинамічних функцій в рамках даного підходу.

В якості ілюстрації розглянуто випадок однозонної моделі Хаббарда. Шляхом підсумовування однопетлевих внесків до власноенергетичної частини та кінцевих частин для одноелектронної мацубарівської функції Гріна отримано вираз

$$\tilde{g}_\alpha^{pq}(\vec{k}, \omega) = \frac{1}{i\omega - \varepsilon^{pq}(\vec{k}) - Q^{pq}} = \frac{1}{i\omega - \tilde{\varepsilon}^{pq}(\vec{k})} = \frac{1}{i\omega - \tilde{\varepsilon}^{pq} - t_k B^{pq}}, \quad (7)$$

де $\varepsilon^{pq}(\vec{k}) = \varepsilon^p - \varepsilon^q + t_k B^{pq}$ - енергетична зона в наближенні Хаббард-I, Q^{pq} - зсув зони одноелектронних збуджень, який визначається самоузгоджено (через \overline{pq} позначено зміну спіну, $\overline{41} = 31$ і т.п.). Записано вирази для кінцевих частин функцій Гріна $B^{pq} = \langle \hat{B}^{pq} \rangle = \langle X^{pp} + X^{qq} \rangle$, які визначають ширину підзон:

$$B^{pq} = Sp(\hat{B}^{pq} e^{-\beta H_{\text{eff}}}) / Sp(e^{-\beta H_{\text{eff}}}) - \frac{1}{2} \text{th} \frac{\beta}{2} \tilde{\varepsilon}^{pq} + \frac{1}{2N} \text{th} \frac{\beta}{2} (\tilde{\varepsilon}^{pq} + t_k B^{pq}), \quad (8)$$

$$Q^{pq} = \frac{1}{2N} \sum_k \text{th} \frac{\beta}{2} (\tilde{\varepsilon}^{pq} + t_k B^{pq}), \quad (9)$$

$$H_{eff} = H_o + \sum_{\{pq\}} \sum_i Q^{pq} \hat{B}_i^{pq}. \quad (10)$$

Рівняння (8), (9) формують систему, яка розв'язується самоузгоджено. Вигляд ефективного гамільтоніану (10) вказує на середньопольове походження УНХФ – перенос формує поле, яке впливає на концентрацію електронів на вузлах.

Вперше отримано вираз для вільної енергії в рамках даного наближення:

$$F = \mu n - T \ln Sp(e^{-\beta H_{eff}}) - \sum_{\{pq\}} Q^{pq} B^{pq} + \frac{1}{\beta N} \sum_k \ln \frac{\text{ch} \frac{\beta}{2} (\tilde{\varepsilon}^{pq})}{\text{ch} \frac{\beta}{2} (\tilde{\varepsilon}^{pq} + t_k B^{pq})}, \quad (11)$$

що робить можливим аналіз рівноважних станів та фазових переходів в системі

Даний підхід узагальнено на двопідгратковий випадок ПЕМ (6). Завдяки тому, що перенос здійснюється лише в підгратках, а оператори Хаббарда комутують з операторами псевдоспінів, наведені вирази ускладнюються лише завдяки додатковому індексу, який визначає належність до підгратки ($\alpha = 1, 2$). Кількість підзон в спектрі зростає до восьми. Отримані рівняння дали можливість одночасно врахувати в моделі (6) далекодійочу псевдоспін-псевдоспінову взаємодію та електронний перенос. Досліджено випадок сильної кулонівської кореляції U , рівного нулю тунельного розщеплення Ω , взаємодія між псевдоспінами в межах кластера включена у взаємодії $J_{ij}^{\alpha\beta}$. Ефективний гамільтоніан для ПЕМ має вигляд:

$$H_{eff} = H_o + \sum_{\{pq\}} \sum_{i\alpha} Q_{\alpha}^{pq} \hat{B}_{i\alpha}^{pq} - \sum_{i\alpha\beta} J_{\alpha\beta} \langle S_{\beta}^Z \rangle S_{i\alpha}^Z, \quad (12)$$

Шляхом розв'язання системи рівнянь (8-9), та відбору серед розв'язків тих, на яких реалізується мінімум вільної енергії (11), побудовано фазові діаграми. При цьому було враховано розщеплення електронного спектру на підзони під впливом псевдоспін-електронної взаємодії. Розрахунок фазових діаграм в режимі $\mu = const$ показав, що як пряма псевдоспін-псевдоспінова взаємодія, так і електронний перенос сприяють утворенню фази сегнетоелектричного типу – піднімається температура фазового переходу при наявності двох типів взаємодії. Ефективна псевдоспін-псевдоспінова взаємодія, сформована переносом, певним чином відповідає $J_{\alpha\alpha}$ - прямій взаємодії в площині (оскільки немає переносу між підгратками). Тому при нульовій прямій взаємодії між псевдоспінами, виникає тільки фазовий перехід з стрибком параметра $\xi = \langle S_1^Z - S_2^Z \rangle$ (рис. 5). В режимі $n = const$ поведінка хімічного потенціалу як функції концентрації показує на появу в системі фазового розшарування, яке настає по температурі швидше від появи сегнетофази. Рис. 6 ілюструє перебудову спектру та появу відразу двох областей розшарування

$n_1 < n < n_2$ та $n_3 < n < n_4$, при концентраціях $n_2 < n < n_3$ має місце звичайна сегнетоелектрична фаза; фазове розшарування настає за умови локалізації хімпотенціалу в межах однієї з підзон. Система розшарується на області з різною концентрацією n_1, n_2 та n_3, n_4 та різною поляризацією, розширюючи область сегнетофазу. Побудовано фазові діаграми розшарованих станів.

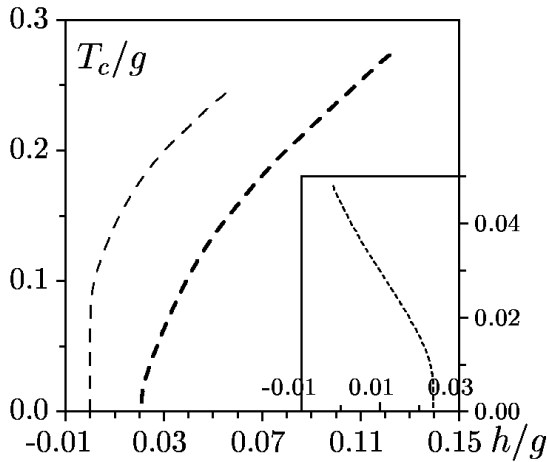


Рис. 5 Залежність температури фазового переходу сегнетоелектричного типу T_c від параметра h в режимі $\mu = const = -g$. Жирні лінії - $t_{ij} = 0.2g$, тонкі лінії - $t_{ij} = 0$. а) $J_{11} = g, J_{12} = 0$ б) $J_{11} = J_{12} = 0$.

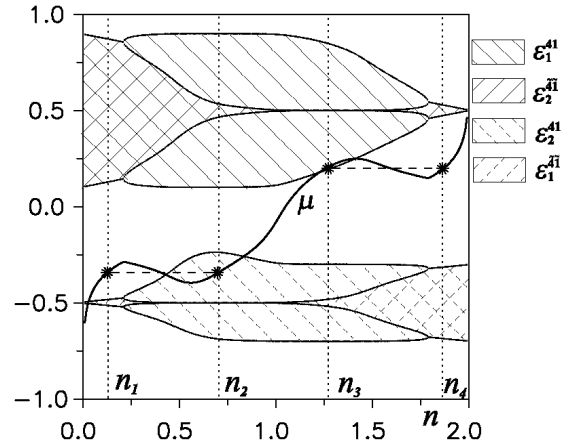


Рис. 6 Залежність параметра порядку зонного спектру від концентрації. Значення параметрів: $J_{11} = J_{12} = g/2, T = t_{ij} = 0.1g, h = 0.5g$.

Отримані результати узгоджуються з отриманими в останній час експериментальними роботами по нейтронному розсіяню та КР-спектроскопії для ВТНП, у яких виявлено розшарування на смуги з різною концентрацією носіїв (Emery V.J., Kivelson, S.A., and Tranquada J.M. cond-matt/9907228, 1999) та зарядові неоднорідності, пов'язані з перерозподілом площинного кисню (Piev M.N., Hadjiev V.G. and Ivanov V.G. //Journ. Raman. Spectr., 1996, **27**, 333-349).

Основні результати та висновки

1. За допомогою теорії збурень по переносу для однопідграткової псевдоспін-електронної моделі (ПЕМ) отримано ефективний гамільтоніан, що описує електронні взаємодії при заданій псевдоспінівій конфігурації. Виявлено роль таких взаємодій у формуванні зарядовпорядкованого стану (модуляція концентрації n та середнього значення псевдоспіну $\langle S^z \rangle$). Встановлено умови появи зарядового впорядкування при різних значеннях параметрів моделі. Виявлено, що модуляція з подвоєним періодом ґратки настає при $0 < h < g$. Знайдено температуру фазового переходу в залежності від концентрації електронів.
2. Запропоновано двопідграткову ПЕМ, що є узагальненням моделі Міцуї і відповідає центросиметричній кристалічній структурі високотемпературних надпровідників. Виявлено можли-

вість існування нецентросиметричної фази з некомпенсованим значенням $\eta = \langle S_1^Z + S_2^Z \rangle$.

Побудовано фазові (T, h) та (T, n) діаграми при врахуванні далекосяжної псевдоспін-псевдоспінової взаємодії у наближенні середнього поля та точному врахуванні короткосяжної взаємодії в межах двочастинкового кластера, встановлено рід фазових переходів.

3. У граничному випадку відсутності переносу електронів та далекодіючої псевдоспін-псевдоспінової взаємодії проведено розрахунки діелектричної сприйнятливості моделі в області низьких температур для різних режимів: $n = const$ та $\mu = const$. Показано, що вплив тунельного розщеплення Ω на поведінку сприйнятливості є суттєвим для областей, де знімається виродження основного стану (в цьому випадку закон Кюрі змінюється експоненційною поведінкою з максимумом $\chi_{\perp} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{cJ}{\Omega^2}$).

4. Проведено аналіз термодинамічних функцій двопідграткової ПЕМ у однопетловому наближенні (що відповідає врахуванню внесків з однією сумою по хвильовому вектору до термодинамічного потенціалу). Досліджено трансформацію фазових діаграм при зміні радіуса далекосяжної взаємодії.

5. Запропоновано самоузгоджену схему врахування середньопольових внесків в рамках узагальненого наближення хаотичних фаз (УНХФ) для моделей з сильною кореляцією електронів. Показано, що даний підхід в УНХФ, якщо знехтувати вкладом бозонних функцій Гріна, є наближенням однієї суми по хвильовому вектору \mathbf{k} та частоті ω для власноенергетичної частини та середніх від операторів Хаббарда. В рамках запропонованої схеми, отримано рівняння для параметрів самоузгодження та вираз для вільної енергії, що дозволяє використовувати УНХФ для аналізу термодинамічних властивостей та дослідження фазових переходів.

6. В режимі постійного значення хімпотенціалу досліджено роль електронного переносу (поряд з прямою псевдоспін-псевдоспіновою взаємодією) у фазових переходах з зміною n та $\langle S^Z \rangle$. Показано, що ефективна взаємодія, спричинена електронним переносом, сприяє появі сегнетоелектричної фази, а при відсутності прямої взаємодії є сама в стані викликати фазовий перехід зі стрибком параметра $\xi = \langle S_1^Z - S_2^Z \rangle$ (без появи, однак, сегнетофази).

7. Аналіз поведінки хімічного потенціалу та вільної енергії як функції концентрації виявив наявність в двопідгратковій псевдоспін-електронній моделі фазового розшарування в режимі $n = const$ причиною якого є пряма взаємодія між псевдоспінами, або викликана переносом ефективна взаємодія між електронами. Хімічний потенціал при цьому знаходиться в області однієї з підзон, що виникають в результаті розщеплення в енергетичному спектрі.

8. Встановлено, що в залежності від значень параметрів прямої взаємодії можуть існувати на площині (n, h) одна або дві області, де має місце фазове розшарування; електронний перенос впливає на їх межі. Відбувається розшарування на стани з різними значеннями n ; можливою є ситуація, коли одна з фаз при цьому є сегнетоелектричною.

Результати дисертації опубліковано в таких роботах:

1. Stasyuk I.V., Shvaika A.M., Danyliv O.D. Effective interactions and charge ordering in the model with local anharmonicity for HTSC systems. - Proc. of the IS-HTS-TP'94 2nd Inter. Symp. On High Temperature Superconductivity and Tunneling Phenomena", September 3-6, 1994, Slavyanogorsk (Donetsk), Ukraine. - Donetsk, 1995. -p. 84-87.
2. Stasyuk I.V., Shvaika A.M. and Danyliv O.D. Dielectric instability and charge ordering in the local anharmonic model of high T_c superconductors. // Molecular Physics Reports. - 1995. - 9. - p. 61-75.
3. Danyliv O.D., Stasyuk I.V. The analysis of ferroelectric type instabilities in the two-sublattice model of high temperature superconducting systems. // Cond. Mat. Phys. - 1996. - 7. - p. 163-177.
4. Danyliv O.D. Phase transitions in the two-sublattice pseudospin-electron model of high temperature superconducting systems. // Physica C. - 1998. - 309. - p. 303-314.
5. Stasyuk I.V., Danyliv O.D. Thermodynamics of pseudospin-electron model in mean field approximation // Phys. Stat. Sol. B. - 2000. - 219. - p. 299-312.
6. Стасюк І.В., Данилів О.Д. Врахування ефективної взаємодії в моделі Хаббарда з локальним ангармонізмом // Львів, 1994, 24с. (Препринт / Укр.Акад.Наук ІФКС; ICMP-94-6U).
7. Stasyuk I.V., Danyliv O.D. Structural phase transitions in the two-sublattice pseudospin-electron model of high temperature superconducting systems. - Lviv, 1997. - 20 p. - (Preprint / Nat. Acad. of Sci. of Ukraine. Inst. for Cond. Matt. Phys.: ICMP-97-28E).
8. Stasyuk I.V., Shvaika A.M., Danyliv O.D. Dielectric instability and charge ordering in the local anharmonic model of high- T_c superconductors // Abstr. Ampere Workshop on Magnetic Resonance and Microwave Absorption in the high- T_c Superconducting Materials, Poznan, April 10-13, 1994.-p. 60.
9. Stasyuk I.V., Shvaika A.M., Danyliv O.D. Thermodynamic functions and many particle correlations in the Hubbard model with strong coupling to anharmonic lattice modes // In: Programme and Abstracts of the International Conference on Magnetism 1994, p. 53, 22-26 August 1994, Warsaw, Poland.
10. Stasyuk I.V., Danyliv O.D. A model description of ferroelectric type instabilities in high- T_c superconductors of YBaCuO family.// 5th World congress on superconductivity, July 7-11, 1996, Technical university of Budapest, Budapest, Hungary: Abstracts.- Budapest, 1996.
11. Stasyuk I.V., Danyliv O.D. Dielectric anomalies and ferroelectric instabilities in the pseudospin-electron models of HTSC systems.// XXII Intern. school and III Polish-Ukrainian meeting on

ferroelectrics physics, Kudowa Zdroj, Poland, September 16-20, 1996: Programme and abstracts.- Kudowa Zdroj, 1996.

12. Данилів О.Д. Однопетлеве наближення для термодинамічних функцій двоплощинної моделі Хаббарда з локальним ангармонізмом. - В кн.: Тези доповідей Наукового семінару з статистичної теорії конденсованих систем, Україна, Львів, Львівський університет ім. І. Франка, ІФКС НАН України, 14-15 березня 1997 р. - С. 61.
13. Danyliv O.D. Thermodynamics of system with strong short-range electron correlations in generalized random-phase approximation. - In: Abstr. INTAS-UKRAINE Workshop on Condensed Matter Physics, Lviv, May 21-24, 1998. - P. 123.
14. Stasyuk I.V., Danyliv O.D. Self-consistent approach for pseudospin-electron model in the theory of HTSC. - In: EPS-II: Trends in Physics, London, 6-10 September 1999.
15. Stasyuk I.V., Danyliv O.D. Thermodynamics of system with strong short-range electron correlations in generalized random-phase approximation. - In: Programme and abstracts EPS-CMD-18. Montreux, 13-17 March, 2000.

Данилів О.Д. Термодинаміка двопідграткової псевдоспін-електронної моделі в теорії сильнокорельованих електронних систем - Рукопис.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.02 – теоретична фізика. Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України, Львів, 2000.

Дисертація присвячена теоретичному дослідженню псевдоспін-електронної моделі. Встановлено, що електронний перенос формує залежну від конфігурації псевдоспінів взаємодію між електронами, яка приводить до появи зарядовпорядкованих станів. Запропоновано двопідграткову псевдоспін-електронну модель для опису ангармонізмів та граткових нестійкостей у високотемпературних надпровідниках типу YBaCuO. Дано самоузгоджену схему розрахунку термодинамічних функцій в рамках діаграмного формулювання узагальненого наближення хаотичних фаз. В режимах $\mu = const$ та $n = const$ досліджено фазові переходи та пов'язані з ними нестійкості сегнетоелектричного типу і фазові розшарування, зумовлені як прямою взаємодією між псевдоспінами, так і ефективною взаємодією, сформованою електронним переносом.

Ключові слова: електронна кореляція, псевдоспін-електронна взаємодія, зарядовпорядковані стани, сегнетоелектричні аномалії, фазові розшарування, високотемпературні надпровідники.

Данилів О.Д. Термодинаміка двухподрешеточной псевдоспин-электронной модели в теории сильнокоррелированных электронных систем - Рукопись.

Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 – теоретическая физика. Институт физики конденсированных систем

Национальной академии наук Украины, Львов, 2000.

Диссертация посвящена теоретическому исследованию псевдоспин-электронной модели. Установлено, что электронный перенос формирует зависимое от конфигурации псевдоспинов взаимодействие между электронами, которое приводит к появлению зарядоупорядоченных состояний. Предложена двухподрешеточная псевдоспин-электронная модель для описания ангармонизмов и решеточных нестабильностей в высокотемпературных сверхпроводниках типа YBaCuO. Дана самосогласованная схема расчета термодинамических функций в рамках диаграммной формулировки обобщенного приближения хаотических фаз. В режимах $\mu = const$ и $n = const$ исследованы фазовые переходы и связанные с ними нестабильности сегнетоэлектрического типа и фазовые расслоения, вызванные как прямым взаимодействием между псевдоспинами, так и эффективным взаимодействием, сформированным электронным переносом.

Ключевые слова: *электронная корреляция, псевдоспин-электронное взаимодействие, зарядоупорядоченные состояния, сегнетоэлектрические аномалии, фазовые расслоения, высокотемпературные сверхпроводники.*

Danyliv O.D. Thermodynamics of the two-sublattice pseudospin-electron model in the theory of strong correlated electron systems. - Manuscript.

Submitted for the degree of physical and mathematical sciences, speciality 01.04.02 – Theoretical Physics. Institute for Condensed Matter Physics of the Ukrainian National Academy of Sciences, Lviv, 1999.

The subject of thesis is the theoretical study of thermodynamical properties of the pseudospin-electron model, developed for description of dielectric properties and lattice instabilities in the YBaCuO type high- T_c superconductors. Within the model the Hubbard electron correlation as well as interaction of electrons with pseudospin degrees of freedom (which describe the anharmonic structure units) are taken into account.

It is shown with the use of perturbation theory that the electron transfer results in the effective interaction between electrons that depend on the configuration and dynamics of pseudospins. The results of investigation, performed within the mean field approximation with the exact treatment of the single-site correlations, point out to the instability of the system with respect to the phase separation at the edge of Brillouin zone ($\vec{k} = (\frac{\pi}{a}; \frac{\pi}{a})$). It corresponds to the modulation of the electron concentration and the pseudospin mean value $\langle S^Z \rangle$. The equation for the phase transition temperature and expression for T_c in the case of low temperatures are derived. The tunnelling of pseudospins can enhance T_c and extend the ordering region. The analysis of chemical potential behaviour as the function of concentration reveals the possibility of the phase separation in the simple pseudospin-electron model.

To describe the real centrosymmetric structure of high- T_c superconductors, the two-sublattice pseudospin-electron model is proposed. The model is considered in the two different regimes: the fixed value of chemical potential ($\mu = const$) or fixed electron concentration ($n = const$). The static dielectric susceptibility χ_{\perp} along c -axis is calculated in the zero order approximation. In this case the electron transfer and long-range pseudospin-pseudospin interaction are neglected but pseudospin interaction J within unit cell is taken into account. The regions of the model parameters values with Curie law ($\chi_{\perp} \sim C/T$) behaviour are established. The pseudospin tunnelling splits in these regions the degenerated ground state, the Curie law is substituted by more complicated function with maximum $\chi_{\perp} \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{CJ}{\Omega^2}$.

It is shown that the long-range pseudospin-pseudospin interaction can lead to the phase transitions into the phase with noncompensated mean value $\eta = \langle S_1^Z + S_2^Z \rangle$. The corresponding (T, h) and (T, n) phase diagrams are built within the mean field and the one-loop approximations for the wide range of model parameter values. The regions of existence of ferroelectric type instabilities as well as phase separated states (with separation into phases with different $\langle S^Z \rangle$ and n values) are established.

The role of effective (caused by electron transfer) interaction between pseudospins besides the direct pseudospin-pseudospin interaction in thermodynamics of the two-sublattice pseudospin-electron model is considered. With this aim the self-consistent extension of the generalized random-phase approximation (GRPA) is proposed. It is made by separation of equations for the “end” parts and self-energy parts of electron Green’s functions with the inclusion of the mean field type contributions. For the first time in the GRPA method, the expressions for the thermodynamic functions are derived. Within proposed scheme the phase diagrams having a relation to the ferroelectric type instabilities and phase separation effects are derived. It is shown that the electron transfer increases the temperature of the phase transition into the noncentrosymmetric phase and can alone produce the transition with the jump of $\langle S^Z \rangle$ or the phase separation in the $n = const$ regime; the separation process extends the region of existence of noncentrosymmetric phase.

On the basis of the electron band spectrum calculation (with an account of the energy levels splitting caused by the Hubbard correlation and short-range interaction with pseudospins) the effect of the location of the electron chemical potential on the phase transitions is considered. It is shown that the phase separation takes place when the chemical potential is placed in the one of electron subbands.

Key words: *electron correlation, pseudospin-electron interaction, charge-ordered states, ferroelectric instabilities, phase separations, high-temperature superconductors.*

Підписано до друку 17.11.2000. Формат 60x84/16.

Ум. друк. арк. 1,0. Тираж 100. Зам.155.

Друк ТзОВ “Сплайн”, м.Львів, вул. Коперніка, 11.