

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ІНСТИТУТ ФІЗИКИ КОНДЕНСОВАНИХ СИСТЕМ

На правах рукопису

МИСАКОВИЧ Тарас Степанович

УДК 535.375.54, 538.945, 538.956

**ДОСЛІДЖЕННЯ ФАЗОВИХ ПЕРЕХОДІВ
ТА КОМБІНАЦІЙНОГО РОЗСІЯННЯ В
ЛОКАЛЬНО-АНГАРМОНІЧНИХ СИСТЕМАХ З
СИЛЬНИМИ ЕЛЕКТРОННИМИ КОРЕЛЯЦІЯМИ**

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 — 2005

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, завідувач відділу квантової статистики, заступник директора.
- Офіційні опоненти — доктор фізико-математичних наук, професор **Швець Валерій Тимофійович**, Одеська державна академія холоду Міністерства освіти і науки України, завідувач кафедри вищої математики, проректор.
- доктор фізико-математичних наук, професор **Ваврух Маркіян Васильович**, Львівський національний університет імені Івана Франка Міністерства освіти і науки України, завідувач кафедри астрофізики.
- Провідна організація — Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України, м. Київ, відділ нелінійної фізики конденсованого стану.

Захист відбудеться “ 14 ” липня 2005 року о “ 15³⁰ ” 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 “ 9 ” червня 2005 року.

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

Т.Є.Крохмальський

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми. Останнім часом розпочався активний розвиток теоретичного опису електронного комбінаційного розсіяння (КР) світла в зв'язку з появою нових методів теоретичного дослідження моделей, що використовуються в теорії сильноскорельованих електронних систем, а також завдяки розширенню експериментальних досліджень у цій області. В першу чергу сюди слід віднести дослідження низькочастотної динаміки високотемпературних надпровідників (ВТНП), де крім фононних ліній виділяються смуги, пов'язані з електронним розсіянням - системи типу YBaCuO (див. огляд Cooper S.L. // *Handbook on the Physics and Chemistry of Rare Earths*. Chapt.203. - Amsterdam: Elsevier Science, 2001). Самі ж фононні лінії мають ускладнену структуру, їх частотні профілі зазнають деформації внаслідок ефекту неадиабатичності та впливу змін у розподілі електронної густини.

Для опису ВТНП типу YBaCuO (системи з локально-ангармонічними елементами структури) була запропонована псевдоспін-електронна модель (ПЕМ) (див., напр., Müller K.A. // *Z. Phys. B - Condensed Matter*, 1990, **80**), в якій за допомогою введення псевдоспінової змінної $S^z = \pm 1/2$ явно враховується присутність двох положень рівноваги для апексного іона кисню O4, про що свідчать різноманітні експериментальні дані (EXAFS, комбінаційне розсіяння та ін.). Ця модель враховує взаємодію хаббардівського типу а також взаємодію електронів з локальними коливаннями (псевдоспінами). Не дивлячись на те, що термодинаміка ПЕМ інтенсивно вивчається, відкритою залишається проблема спектру комбінаційного розсіяння для цієї моделі. Зазначимо, що гамільтоніан спрощеної ПЕМ (при виключенні одновузлової взаємодії між електронами) є схожим на гамільтоніан моделі Фалікова-Кімбала (ФК), яка є однією з базових моделей в теорії сильноскорельованих систем і яку застосовують для опису сполук перехідних та рідкісноземельних елементів. Ця модель описує систему, у якій присутня взаємодія між нерухомими та рухомими частинками (електронами). На відміну від моделі ФК, ПЕМ враховує власну динаміку ангармонічної підсистеми (в гамільтоніані ПЕМ є присутній доданок, пов'язаний із тунелюванням з одного мінімуму в інший). Для розрахунку різних внесків в КР світла був використаний метод багаточасових функцій Гріна (Shvaika A.M, Vorobyov O., Freericks J.K, Devereaux T.P. // *Phys. Rev. Let.*, 2004, **93**) та на його основі було проаналізовано резонансні, змішані та нерезонансні електронні вклади в розсіяння для моделі ФК. Слід, однак, відзначити деякі проблеми, пов'язані з застосуванням цього методу, оскільки тоді виникають певні труднощі при переході від уявних до дійсних частот; тому доцільною є розробка методів для опису КР, у яких би вдалося обійти згадані незручності.

Зазначимо, що модель ФК та ПЕМ володіють різноманітністю фаз та фазових переходів. Перші роботи по дослідженню ПЕМ були в основному спрямовані на виявлення можливості виникнення надпровідного стану в моделі (див., напр., Frick M., von der Linden W., Morgenstern I., de Raedt H. // *Z. Phys. B - Condensed Matter*, 1990, **81**; Плакида Н.М., Удовенко В.С. // *Сверхпроводимость: физ., хим., техн.*, 1992, **5**). Наступні дослідження цієї моделі були присвячені аналізу структури електронного спектру, дослідженню зарядових та псевдоспінових кореляцій і діелектричної сприйнятливості, термодинамічних властивостей ПЕМ. В якості наближень в основному застосовувалося узагальнене наближення хаотичних фаз (УНХФ) та певні його удосконалення. Так, було застосовано термодинамічно самоузгоджену схему УНХФ у випадку сильної псевдоспін-електронної взаємодії, коли електронна зона завжди розщеплена і це визначає особливості поведінки системи (Stasyuk I.V., Shvaika A.M., Tabunshchik K.V. // *Condens. Matter Phys.*, 1999, **2**). На основі такого наближення було виявлено наявність в моделі фазових переходів першого та другого роду та можливість виникнення фазового розшарування. Крім методу УНХФ для ПЕМ (і особливо для моделі ФК) також застосовують теорію динамічного середнього поля (ДСП), яка є точною в границі безмежної вимірності простору. Картина фазових переходів для ПЕМ є подібною до тієї, яку отримують для моделі ФК (при цьому у дослідженнях, що стосуються моделі ФК, використовується дещо інший режим термодинамічного усереднення). Разом з тим, відзначимо, що термодинаміка ПЕМ практично не досліджувалася до цього часу для випадку слабкої псевдоспін-електронної взаємодії.

У даній роботі проводиться вивчення термодинамічних властивостей та фазових переходів спрощеної ПЕМ при слабкій взаємодії та аналізується вплив тунелювання на фазові переходи. Поширено метод УНХФ на випадок ПЕМ з тунелюванням. Розвинено метод, придатний для опису комбінаційного розсіяння світла в сильноскорельованих електронних системах, цей метод застосовується для дослідження спектру комбінаційного розсіяння світла в ПЕМ.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами і темами. Дисертаційна робота виконана в Інституті фізики конденсованих систем НАН України в рамках держбюджетних тем “Термодинаміка та кінетика псевдоспін-ферміонних моделей локально-ангармонічних кристалічних і молекулярних систем з сильними хаббардівськими кореляціями” (держреєстрація № 0199U000670), “Дослідження колективних іонних та електрон-іонних процесів у твердих тілах на основі ферміонних граткових моделей” (держреєстрація № 0102U000217) та проекту Державного фонду фундаментальних досліджень “Іонний та електронний транспорт в іонних провідниках та матеріалах з вузькими електронними зонами провідності” (№ 02.07/266).

Мета і задачі дослідження. Метою роботи є дослідження термодинаміки та динаміки псевдоспін-електронної моделі з тунелюванням, яке включає:

- розрахунок внесків у діелектричну сприйнятливість, встановлення умов виникнення діелектричних нестійкостей в псевдоспін-електронній моделі зі слабкою взаємодією;
- розрахунок сприйнятливості в надпровідному каналі та встановлення умов виникнення нестійкості щодо переходу в надпровідний стан;
- термодинамічний аналіз стійкості однорідної та модульованої фаз, дослідження фазових переходів в режимах $n = const$, $\mu = const$;
- вивчення впливу власної динаміки (тунелювання) на фазові переходи;
- розвиток мікроскопічного підходу до опису комбінаційного розсіяння в сильноскорельованих системах та його застосування до псевдоспін-електронної моделі з врахуванням псевдоспінових та електронних внесків в розсіяння.

Об'єктом дослідження є сильноскорельовані системи з локально-ангармонічними елементами структури.

Предметом дослідження є термодинаміка і низькочастотна динаміка псевдоспін-електронної моделі з тунелюванням.

Методи дослідження. У роботі використано метод двочасових функцій Гріна, діаграмну техніку для сумування рядів теорії збурень, що виникають при розрахунку температурних (мацубарівських) функцій Гріна, формалізм операторів Хаббарда, метод “неусереднених” функцій Гріна.

Наукова новизна одержаних результатів. Вперше для спрощеної псевдоспін-електронної моделі з тунелюванням зі слабкою псевдоспін-електронною взаємодією розраховано в рамках УНХФ ізотермічну та ізольовану діелектричну сприйнятливості системи. Встановлено можливість виникнення нестійкостей щодо переходу між однорідними фазами (при розташуванні хімічного потенціалу μ поблизу країв зони), переходу в фазу з подвійною модуляцією періоду ґратки (при розташуванні хімічного потенціалу поблизу центру зони) та переходу у фазу з неспівмірною модуляцією періоду (при проміжних значеннях хімічного потенціалу). Виявлено, що надпровідний стан у системі виникає при далекому від половинного заповненні електронної зони. Побудовано відповідні фазові (T, μ) діаграми. При зростанні параметра тунелювання розширюється область простору параметрів, де має місце перехід у надпровідний стан, та звужується область такого простору, де має місце перехід у зарядовопорядкований стан. Встановлено, що статичні ізотермічна і ізольована сприйнятливості ПЕМ не співпадають, що є свідченням неергодичності даної моделі.

Вперше для спрощеної псевдоспін-електронної моделі з тунелюванням зі слабкою псевдоспін-електронною взаємодією досліджено термодинамічно рівноважні стани, побудовано (T, h) діаграми в режимі $\mu = const$ та (n, h) діаграми в режимі $n = const$. Виявлено можливість переходу першого роду між однорідними фазами та переходу першого або другого роду між однорідною та модульованою (з подвійною модуляцією періоду ґратки) фазами в режимі $\mu = const$. В режимі постійної концентрації відбувається при цьому розшарування на відповідні фази. При зростанні параметра тунелювання Ω звужується область фазового розшарування та понижується критична температура. Показано, що не існує критичного значення Ω , при якому зникає можливість переходу у фазу з подвійною модуляцією періоду ґратки.

Вперше для опису комбінаційного розсіяння світла в псевдоспін-електронній моделі застосовано підхід, при якому оператор поляризованості виражається через “неусереднену” функцію Гріна, побудовану на операторах дипольного моменту. Показано зв'язок цього підходу зі стандартним методом для випадку наближення сильного зв'язку, при цьому відтворено резонансні та нерезонансні електронні внески в розсіяння.

При побудові оператора поляризованості використано для випадку сильної псевдоспін-електронної взаємодії константу електронного переносу як формальний параметр розкладу, в той час як при слабкій взаємодії застосовано процедуру розщеплення “неусереднених” функцій Гріна вищих порядків.

Для ПЕМ на основі УНХФ досліджено внески в розсіяння, що походять від псевдоспінової та електронної підсистем. Встановлено, що для випадку сильної взаємодії спектр КР в цілому є розщепленим (присутні кілька ліній, інтенсивності яких перерозподіляються при зміні електронної концентрації), в той час як при слабкій взаємодії в спектрі є лише одна лінія. Для випадку сильних псевдоспін-електронної та одновузлової електронної взаємодій більш детальне дослідження структури однієї з ліній виявило присутність когерентної (у формі вузького піку) та некогерентної (розмита смуга) частин.

Практичне значення одержаних результатів. Отримані результати можна використовувати при інтерпретації експериментальних даних, що стосуються спектрів електронного та змішаного (електрон-коливного) комбінаційного розсіяння в сильноскорельованих локально-ангармонічних системах. Крім цього, результати, що стосуються термодинаміки та фазових переходів у ПЕМ, будуть корисними при інтерпретації експериментів, що стосуються появи неоднорідних станів у високотемпературних надпровідниках (кристали типу YBaCuO) і можуть сприяти (в подальшому) більш глибокому розумінню природи надпровідного стану.

Використана схема для розрахунку оператора поляризованості та тензора розсіяння для сильноскорельованих електронних систем (зокрема, систем з локальними ангармонізмами) може бути застосована для подальшого розвитку теорії комбінаційного розсіяння світла в таких системах (зокрема, в сполуках з перехідними та рідкісноземельними елементами).

Особистий внесок здобувача. Автор приймав безпосередню участь в розрахунку діелектричної сприйнятливості в рамках схеми УНХФ та термодинамічних функцій, в розвитку методу для побудови оператора поляризованості в системах з хаббардівськими кореляціями, в отриманні виразу для оператора поляризованості при слабкій та сильній псевдоспін-електронній взаємодії та в отриманні виразу для тензора розсіяння для випадку двомагнетонних внесків в розсіяння. Особисто автором розраховано сприйнятливість в надпровідному каналі, за допомогою діаграмної техніки для Х-операторів в рамках УНХФ розраховано тензор комбінаційного розсіяння для випадку сильної взаємодії в псевдоспін-електронній моделі, отримано вираз для спектру псевдоспін-хвильових збуджень для випадку слабкої псевдоспін-електронної взаємодії, виконано усі числові розрахунки в роботі. Автор також приймав безпосередню участь в аналізі та інтерпретації усіх результатів, отриманих в даній роботі.

Апробація роботи. Результати дисертації представлялись на таких конференціях: ІНТАС-Україна: міжнародна робоча нарада з фізики конденсованої речовини (Львів, 1998 р.), XIV міжнародна школа-семінар “Спектроскопія молекул та кристалів” (Одеса, 1999 р.), Міжнародна робоча нарада з сучасних проблем теорії м'якої речовини (Львів, 2000 р.), 6-та міжнародна конференція по матеріалах та механізмах надпровідності та високотемпературних надпровідниках (Х'юстон, США, 2000 р.), Друга міжнародна робоча нарада в Пампорово по кооперативних явищах в теорії конденсованої речовини (Пампорово, Болгарія, 2001 р.), Європейська конференція “Фізика магнетизму'02” (Познань, Польща, 2002 р.), Міжнародна конференція по сильноскорельованих електронних системах (Краків, Польща, 2002 р.), IV міжнародна школа-конференція “Актуальні проблеми фізики напівпровідників” (Дрогобич, 2003 р.), 7-ма міжнародна конференція по спектроскопії новітніх надпровідників (Сітгес, Іспанія, 2004 р.). Вони також доповідались і обговорювались на семінарі Інституту фізики конденсованих систем НАН України і на семінарах відділу квантової статистики цього інституту.

Публікації. За матеріалами дисертації опубліковано 18 робіт, в тому числі 8 статей в наукових журналах, визначених переліком ВАК України, 1 препринт та 9 тез міжнародних конференцій. Перелік публікацій подано в кінці автореферату.

Структура та об'єм дисертації. Дисертаційна робота складається із вступу, чотирьох розділів, висновків та списку використаних літературних джерел. Робота викладена на 139 сторінках, список літературних джерел містить 168 найменувань.

ЗМІСТ РОБОТИ

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

У **першому розділі** приведено деякі експериментальні результати та обговорено стан теоретичного опису особливостей комбінаційного розсіяння світла в ВТНП та в сильноскорельованих системах. Зроблено короткий огляд основних результатів теоретичних та експериментальних досліджень, які покладені в основу псевдоспін-електронної моделі. Обговорено ряд результатів досліджень ПЕМ та моделі Фалікова-Кімбала, яка відповідає псевдоспін-електронній моделі при відсутності тунелювання та одновузлової взаємодії між електронами.

В **другому розділі** дисертації проведено розрахунок діелектричної сприйнятливості а також сприйнятливості у надпровідному каналі для спрощеної псевдоспін-електронної моделі з тунелюванням при слабкій псевдоспін-електронній взаємодії. Ізотермічну діелектричну сприйнятливість χ_T розраховано в УНХФ за допомогою теорії збурень та діаграмної техніки. Ізольовану сприйнятливості χ_I знайдено за допомогою методу рівнянь руху для двочасових функцій Гріна. Проаналізовано можливість переходу системи у зарядововпорядкований стан та у надпровідний стан в залежності від значень різних параметрів моделі.

Гамільтоніан псевдоспін-електронної моделі має вигляд

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

$$H_i = U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \mu (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) + g (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) S_i^z - h S_i^z + \Omega S_i^x, \quad (2)$$

де враховано одновузлову електронну взаємодію $U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$, псевдоспін-електронну взаємодію $g (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) S_i^z$, асиметрію локального ангармонічного потенціалу $h S_i^z$, тунельне розщеплення двох найнижчих коливних рівнів ΩS_i^x у локальному ангармонічному потенціалі.

У випадку слабкої псевдоспін-електронної взаємодії ($g < W$, W - півширина незбуреної електронної зони) та відсутності одновузлової взаємодії між електронами у ролі гамільтоніану нульового наближення вибрано гамільтоніан у наближенні середнього поля

$$H_0 = \sum_i [(g\eta - \mu)(n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) + (gn - h)S_i^z + \Omega S_i^x - gn\eta] + \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} \quad (3)$$

$$H_{\text{int}} = g \sum_i (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow} - n)(S_i^z - \eta), \text{ де } \langle \sum_{\sigma} n_{i\sigma} \rangle = n, \langle S_i^z \rangle = \eta. \quad (4)$$

Діелектричну сприйнятливість знайдено з використанням теорії збурень та діаграмної техніки в рамках підходу типу УНХФ (див. Izyumov Yu.A., Letfulov B.M. // J. Phys.: Condens. Matter, 1990, 2). До розгляду прийнято діаграми, що мають структуру багатопетлевих ланцюжків, з'єднання між петлями відбувається за допомогою кумулянтів або бозонних (псевдоспінових) функцій Гріна. В аналітичній формі псевдоспіновий внесок в ізотермічну сприйнятливість має такий вигляд (подібним чином записуються електронні та змішані внески):

$$\langle TS^z S^z \rangle = - \frac{\Sigma}{1 - g^2 \Sigma \Pi}, \quad (5)$$

$$\text{де } \Pi_q(\omega_n) = \frac{2}{N} \sum_k \frac{n(t_k) - n(t_{k-q})}{i\omega_n + t_k - t_{k-q}} - \text{внесок електронної петлі,}$$

$$\Sigma(\omega_n) = \sin^2 \theta \frac{\lambda \langle \sigma^z \rangle_0}{(i\omega_n)^2 - \lambda^2} - \beta b' \cos^2 \theta \delta(\omega_n) - \text{незвідна частина,}$$

$$\cos \theta = \frac{h - gn}{\lambda}, \quad b' = \frac{\partial b}{\partial (\beta \lambda)}, \quad b = \langle \sigma^z \rangle_0 = \frac{1}{2} \tanh \frac{\beta \lambda}{2}, \quad \lambda = \sqrt{(gn - h)^2 + \Omega^2}.$$

Ізольовану діелектричну сприйнятливість χ_I розраховано методом рівнянь руху для двочасових функцій Гріна при застосуванні розщеплень типу розщеплення Тяблікова; виявлено, що псевдоспіновий внесок в ізольовану сприйнятливість має вигляд (5), однак не містить внеску, пропорційного $\delta(\omega_n)$. Це фактично є проявом неергодичності ПЕМ.

При розрахунку статичної сприйнятливості в надпровідному каналі враховано діаграми, що відповідають драбинковому наближенню, отримано рівняння Бете-Солпітера для вершинної частини

$$\Gamma_{\omega_1 \omega_2}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = \Gamma_{\omega_1 \omega_2}^0(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) + T \sum_{k_3 \omega_3} \Gamma_{\omega_1 \omega_3}^0(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_3) \chi_{\omega_3}^0(\mathbf{k}_3) \Gamma_{\omega_3 \omega_2}(\mathbf{k}_3, \mathbf{k}_2), \quad (6)$$

де $\chi_{\omega}^0(\mathbf{k}) = \frac{1}{N} G_{\mathbf{k}}^0(\omega) G_{-\mathbf{k}}^0(-\omega)$, $G_{\mathbf{k}}^0(\omega)$ - незбурена електронна функція Гріна. Аналіз розбіжності сприйнятливості у надпровідному каналі проведено, виходячи з умови: матриця розсіяння

$\tilde{T}_{\omega_1\omega_2} = T \sum_{\mathbf{k}} \chi_{\omega_1}^0(\mathbf{k}) \Gamma_{\omega_1\omega_2}^0$ повинна мати одиничне власне значення (Owen C.S., Scalapino D.J. // Physica, 1971, **55**); числовий розрахунок проведено з врахуванням дискретності мацубарівських частот.

Проведені розрахунки виявили наявність розбіжностей як статичної діелектричної сприйнятливості (що свідчить про нестійкість щодо виникнення зарядовоупорядкованого стану (ЗВС)) так і сприйнятливості в надпровідному каналі (тобто можливість виникнення надпровідного стану (НС)). У ролі критичних температур взято найвищі з тих, при яких мають місце дані розбіжності, на площині (T, h) . Критична температура переходів в зарядовоупорядкований стан залежить від хвильового вектора модуляції $\mathbf{q} = (q, q)$ (розглянено випадок квадратної ґратки).

Досліджено залежність хвильового вектора модуляції, температури переходу до ЗВС та температури переходу до НС від хімічного потенціалу електронів (рис.1). Встановлено, що при знаходженні хімічного потенціалу μ поблизу центру зони у системі є можливим перехід у фазу з подвійною модуляцією періоду ґратки, при проміжних значеннях μ система може перейти у фазу з неспівмірною модуляцією, при розташуванні μ ближче до країв зони у системі існує нестійкість щодо переходу у іншу однорідну фазу (зі стрибками n і η) і при безпосередньому наближенні μ до країв зони виникає можливість переходу у надпровідний стан (зонна енергія має вигляд $\varepsilon_k = t_k + g\eta$; при слабкій взаємодії ($g < W$) зона залишається нерозщепленою). При зростанні параметра тунелювання Ω звужується область значень μ , при яких мають місце переходи у ЗВС

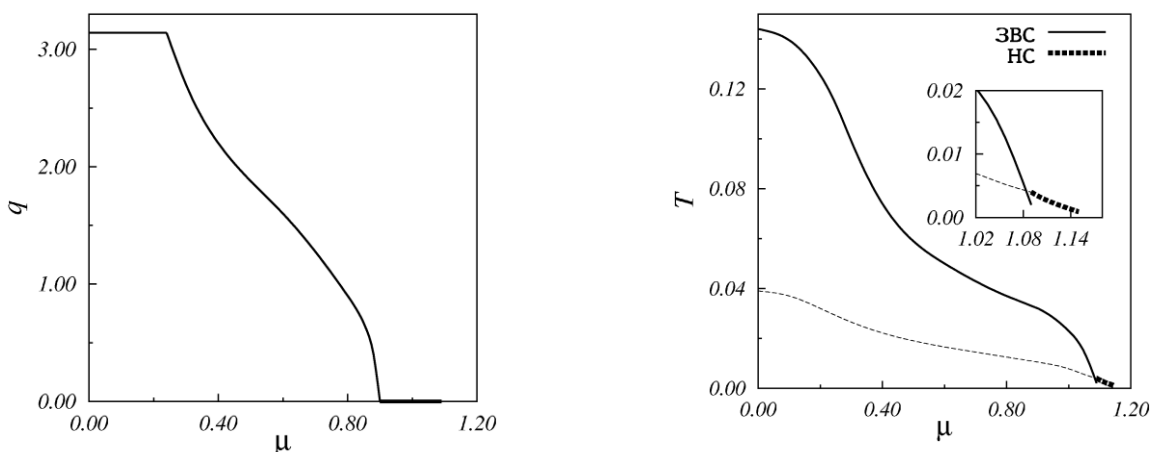


Рис. 1. Залежність хвильового вектора модуляції і температури абсолютної нестійкості високотемпературної фази по відношенню до переходу у ЗВС (суцільна лінія) та у НС (потовщена штрихова лінія) від хімічного потенціалу. $\Omega = 0.06$, $g = 0.5$, $W = 1$.

та збільшується область, де має місце перехід у НС (зокрема, при $\Omega = 0.2$ переходи у ЗВС мають місце лише при $|\mu| < 0.3$).

Третій розділ присвячений дослідженню рівноважних станів та фазових переходів в спрощеній псевдоспін-електронній моделі зі слабкою взаємодією в однорідній фазі та у фазі з подвійною модуляцією періоду ґратки. Досліджено режими $\mu = const$ та $n = const$. Аналіз рівноважних станів проведено, базуючись на термодинамічних критеріях, шляхом пошуку абсолютних мінімумів термодинамічного потенціалу.

Використовуючи гамільтоніан (3) у наближенні середнього поля, отримано систему рівнянь для середньої електронної концентрації та середнього значення псевдоспіна

$$n = \frac{1}{N} \sum_{k\sigma} (e^{\beta(g\eta + t_k - \mu)} + 1)^{-1} \quad (7)$$

$$\eta = \frac{h - gn}{2\lambda} \tanh\left(\frac{\beta\lambda}{2}\right)$$

а також вираз для термодинамічного потенціалу

$$\frac{\Phi}{N} = -\frac{T}{N} \sum_{k\sigma} \ln\left(1 + e^{\frac{\mu - t_k - g\eta}{T}}\right) - T \ln\left(2 \cosh \frac{\beta\lambda}{2}\right) - gn\eta. \quad (8)$$

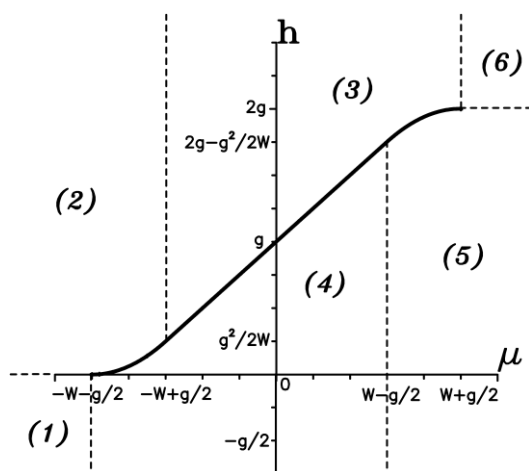


Рис. 2. Діаграма основного стану ($T=0, \Omega=0$). Области з різними значеннями n, η розділені штриховими лініями та суцільною лінією (лінія фазових переходів).

(1) $n = 0, \eta = -1/2$; (2) $n = 0, \eta = 1/2$;

(3) $\eta = 1/2, n = 1 + \frac{\mu}{W} - \frac{g}{2W}$; (4) $\eta = -1/2, n = 1 + \frac{\mu}{W} + \frac{g}{2W}$;

(5) $n = 2, \eta = -1/2$; (6) $n = 2, \eta = 1/2$.

За допомогою числового розв'язку цієї системи рівнянь з умови мінімуму термодинамічного потенціалу Φ встановлено, що в режимі $\mu = const$ при зміні поля h відбувається перехід першого роду між однорідними фазами зі стрибкоподібною зміною середньої електронної концентрації та середнього значення псевдоспіна.

На рис. 2 показано області існування фаз з різними значеннями електронної концентрації та псевдоспіна в площині (h, μ) , потовщеною суцільною лінією позначено лінію фазових переходів.

Побудовано лінію критичних

температур та криві фазових переходів на площині (T, h) , виявлено, що зі зростанням параметра тунелювання Ω понижується температура переходу. В режимі постійної електронної концентрації має місце розшарування на дві однорідні фази, для випадку $T = 0, \Omega = 0$ отримано аналітичний вираз для граничних ліній області фазового розшарування (при використанні прямокутної густини станів):

$$0 < h < \frac{g^2}{2W} : n' = 0, n'' = \sqrt{\frac{2}{W}} h; \quad \frac{g^2}{2W} < h < 2g - \frac{g^2}{2W} : n' = \frac{h}{g} - \frac{g}{2W}, n'' = \frac{h}{g} + \frac{g}{2W};$$

$$2g - \frac{g^2}{2W} < h < 2g : n' = 2 - \sqrt{\frac{2}{W}} (2g - h), n'' = 2.$$

Область фазового розшарування звужується зі зростанням параметра тунелювання Ω .

Показано, що переходи першого роду між однорідними фазами, які мають місце у випадку, коли хімічний потенціал знаходиться поблизу країв зони, можуть відбуватися і при зміні температури (у вузьких інтервалах значень поля h), крива фазового переходу закінчується в критичній точці, розташування якої відповідає температурі абсолютної нестійкості високотемпературної фази (рис. 1).

При дослідженні модульованої фази (яка реалізується якщо μ знаходиться біля центру зони) зроблено формальне розбиття ґратки на дві підґратки, вихідна електронна зона розщеплюється на дві підзони. Отримано вираз для термодинамічного потенціалу у цьому випадку:

$$\frac{\Phi}{N} = -\frac{T}{N} \sum_{k\sigma} \ln\left(1 + e^{\frac{\mu - \lambda_{k1}}{T}}\right) \left(1 + e^{\frac{\mu - \lambda_{k2}}{T}}\right) - T \ln\left(4 \cosh \frac{\beta \tilde{\lambda}_1}{2} \cosh \frac{\beta \tilde{\lambda}_2}{2}\right) - g(n_1 \eta_1 + n_2 \eta_2), \quad (9)$$

$$\lambda_{k\alpha} = g \frac{\eta_1 + \eta_2}{2} + (-1)^\alpha \sqrt{\left(g \frac{\eta_1 - \eta_2}{2}\right)^2 + t_k^2}, \quad \tilde{\lambda}_\alpha = \sqrt{(gn_\alpha - h)^2 + \Omega^2}.$$

На основі аналізу розв'язків системи рівнянь для середніх значень n_i та η_i ($i = 1, 2$) та виходячи з умови мінімуму термодинамічного потенціалу, для випадку фази з подвійною модуляцією періоду ґратки встановлено, що перехід з однорідної фази до такої фази може бути як першого так і другого роду. Виявлено існування трикритичних точок, в яких змінюється рід фазового переходу; це проілюстровано на рис. 3, 4. Можливість переходу першого роду між однорідною фазою та фазою з подвійною модуляцією періоду ґратки свідчить про існування фазового розшарування на ці дві фази в режимі постійної електронної концентрації (див. рис. 5). Для температури переходу другого роду T_c^* (яка є фактично максимальною температурою спінодалі, що відповідає

розбіжності корелятора $\langle TS^z S^z \rangle$ в статичній границі при $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$ - див. розділ 2) отримано

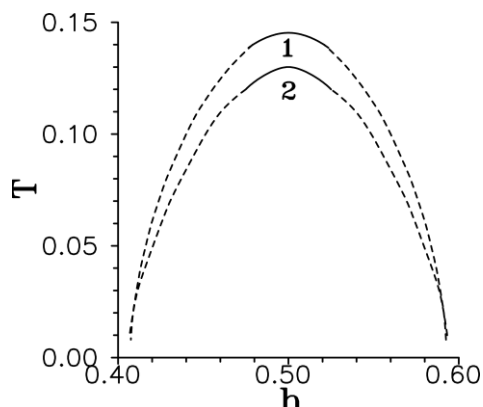


Рис. 3. Лінії фазових переходів (суцільна та штрихова лінії позначають переходи другого та першого роду відповідно) з однорідної фази до фази з подвійною модуляцією періоду ґратки ($\mu=0$, $g=0.5$, $W=1$, **1** - $\Omega=0$, **2** - $\Omega=0.2$).

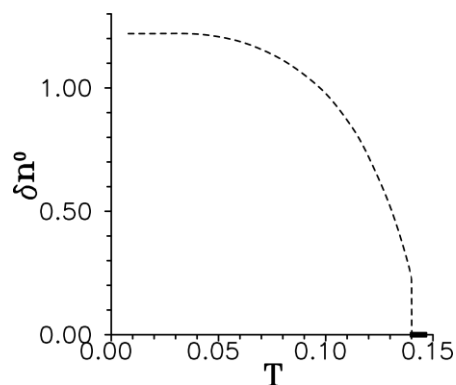


Рис. 4. Температурна залежність різниці $\delta n^0 = n_1^0 - n_2^0$ вздовж лінії фазового переходу ($\mu=0$, $\Omega=0$).

рівняння, яке в симетричному випадку $\mu=0$, $h=g$ має вигляд:

$$1 = -\frac{g^2}{\Omega} \tanh \frac{\beta\Omega}{2} \frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{t_k} (e^{\beta t_k} + 1)^{-1}. \quad (10)$$

При достатньо великих значеннях параметра Ω температура T_c^* (при $\mu=0$, $h=g$) знижується за експоненціальним законом ($T_c^* \sim \exp(-\frac{2\Omega W}{g^2})$ для випадку прямокутної густини станів); при цьому не існує такого критичного значення Ω , при якому зникав би цей перехід.

Отримані нами результати узгоджуються з даними експериментальних робіт по структурних вимірюваннях та КР в ВТНП, у яких відзначається співіснування фаз з різними концентраціями носіїв заряду та присутність фази з періодичною зміною заселеності киснево-мідних ланцюжків у кристалах YBaCuO , що приводить до модуляції положень апексного кисню (Browning V.M., et al. // Phys. Rev.

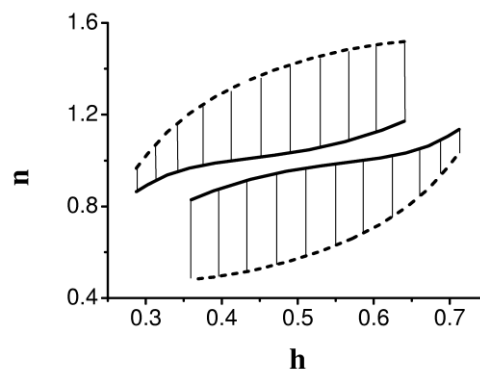


Рис. 5. (n, h) фазова діаграма при $\Omega=0$, $T=0.08$, $g=0.5$, $W=1$. Заштрихована область відповідає станам, розширеним на однорідну фазу (штрихова лінія) та фазу з подвійною модуляцією періоду ґратки (потовщена суцільна лінія).

B, 1997, **56**; Iliev M.N., Hadjiev V.G., Ivanov V.G. // Journ. Ram. Spectr., 1996, **27**).

В четвертому розділі для розрахунку диференціального перерізу комбінаційного розсіяння світла використано мікроскопічну схему, що базується на представленні оператора поляризованості через “неусереднену” функцію Гріна, побудовану на операторах дипольного моменту. Для випадку сильно зв'язаних електронів встановлено співвідношення зі стандартним підходом. Досліджено спектр комбінаційного розсіяння світла в псевдоспін-електронній моделі.

Для опису комбінаційного розсіяння світла в сильноскорельюваних системах застосовано мікроскопічний підхід, при якому переріз розсіяння виражається через корелятор операторів поляризованості, а оператор поляризованості має вигляд

$$\chi_{\mu\nu}(t) = \frac{\omega_1}{\omega_2 V} P_{q_2, -q_1}^{\mu\nu}(\omega_1, t), \quad (11)$$

де оператор $P_{q_2, -q_1}^{\mu\nu}$ виражається через “неусереднену” функцію Гріна (Ivankiv Ya. // Condens. Matter Phys., 1999, 2)

$$\{ \{ M(t) | M(t') \} \} \equiv -i\Theta(t-t')[M(t), M(t')], \quad (12)$$

побудовану на операторах дипольного моменту. Застосовано схему, у якій оператор поляризованості будується на основі рівнянь руху для функцій виду (12) шляхом операторних розкладів за степенями малого параметра. Такий підхід дозволяє уникнути появи багаточасових функцій Гріна та пов'язаних з ними труднощів при переході від уявних до дійсних частот (Shvaika A.M., Vorobyov O., Freericks J.K., Devereaux T.P. // Phys. Rev. Let., 2004, 93). В рамках наближення сильно зв'язаних електронів показано як в межах даного підходу можна відтворити резонансні та нерезонансні внески в електронне розсіяння в границі $q \rightarrow 0$, при цьому оператор поляризованості має вигляд

$$\chi_{\mu\nu}(t) = -\frac{e^2}{V\omega_2^2} \gamma_{\mu\nu}(q_2 - q_1)|_t + \frac{e^2}{V\omega_2^2} \Pi_{q_2, -q_1}^{\mu\nu}(\omega_1, t), \quad \gamma_{\mu\nu}(q_2 - q_1) = \sum_k \frac{\partial^2 \varepsilon_k}{\partial k_\nu \partial k_\mu} c_{k - \frac{q_2 - q_1}{2}}^+ c_{k + \frac{q_2 - q_1}{2}},$$

тут оператор $\Pi_{q_2, -q_1}^{\mu\nu}$ виражається через “неусереднену” функцію Гріна, побудовану на операторах швидкостей.

Показано, як при застосуванні цього методу до моделі Хаббарда для випадку сильної кулонівської взаємодії та близького до половинного заповнення (коли в системі реалізується антиферромагнітне впорядкування) можна відтворити двомагнетонні внески в розсіяння (механізм, описаний Флері і Лоудоном - Fleury P.A., Loudon R. // Phys. Rev., 1968, 166).

Для випадку псевдоспін-електронної моделі враховано псевдоспінові та електронні внески в дипольний момент: $M_i^\alpha = eR_i^\alpha (n_{\uparrow i} + n_{\downarrow i}) + d_s S_i^z \delta_{\alpha, z}$ (маючи на увазі кристали типу $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$, де локально-ангармонічні елементи структури, пов'язані з іонами O_4 , орієнтовані вздовж осі z

перпендикулярно до площин CuO_2), розглянено випадки сильної та слабкої взаємодії. Використовуючи метод рівнянь руху для “неусереднених” функцій Гріна, отримано вирази для оператора поляризованості, при цьому для випадку сильних псевдоспін-електронної та одноузлової електронної взаємодій параметр електронного переносу t використовувався як формальний параметр операторного розкладу, в той час як при слабкому псевдоспін-електронному зв’язку при відсутності одноузлової електронної взаємодії використано процедуру розщеплення функцій Гріна вищих порядків. При $t \rightarrow 0$ в спектрі розсіяння на псевдоспінах присутні піки поблизу частот $\omega_1 - \omega_2 = \lambda_r - \lambda_r$, де індекси r відносяться до одноузлових станів $|i, r\rangle = \cos \phi_r |i, R\rangle - \sin \phi_r |i, \tilde{R}\rangle$, причому $|i, R, \tilde{R}\rangle = |n_{i\uparrow}, n_{i\downarrow}, \pm \frac{1}{2}\rangle$, $R = 1, 2, 3, 4$ (такий базис станів запропоновано в Stasyuk I.V., Shvaika A.M., Schachinger E. // Physica C, 1993, **213**), де ω_2, ω_1 - частоти розсіяного та падаючого світла відповідно. Тут

$$\lambda_{r,\tilde{r}} = -n_r \mu + U \delta_{r,2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{(n_r g - h)^2 + \Omega^2}, \quad \cos 2\phi_r = \frac{n_r g - h}{\sqrt{(n_r g - h)^2 + \Omega^2}}, \quad n_r = 0, 2, 1.$$

Спектр КР є розщепленим, а інтенсивності піків перерозподіляються між собою при зміні електронної концентрації. При ненульовому електронному переносі у випадку сильної взаємодії дане розщеплення зберігається.

Досліджено розсіяння поблизу однієї з частот, $\omega' = \omega_1 - \omega_2 = \sqrt{h^2 + \Omega^2}$ (для випадку відсутності переносу при нульовій температурі ця лінія проявляється в спектрі при $0 < n < 1$). Корелятори, через які виражається тензор розсіяння - $\langle TX^{\tilde{1}\tilde{1}}(\tau) X^{\tilde{1}\tilde{1}} \rangle$ для випадку zz поляризації (вектори поляризації напрямлені вздовж осі z) та $\langle T \sum_{k\sigma} \gamma_k c_{k\sigma}^+(\tau) c_{k\sigma}(\tau) \sum_{k'\sigma'} \gamma_{k'} c_{k'\sigma'}^+ c_{k'\sigma'} \rangle$ для $xx+yy$ поляризації (паралельно до площин CuO_2 , по діагоналі), $\gamma_k = \sum_{\alpha} \frac{\partial^2 t_k}{\partial \mathbf{k}_{\alpha}^2}$ - розраховано в УНХФ з використанням теорії збурень та діаграмної техніки для операторів Хаббарда $X^{rs} = |r\rangle\langle s|$. Зокрема, для фур’є-образу корелятора $\langle TX^{\tilde{1}\tilde{1}}(\tau) X^{\tilde{1}\tilde{1}} \rangle$ отримано вираз

$$K^{\tilde{1}\tilde{1}\tilde{1}\tilde{1}}(q=0, \omega_n) = G + B + DG + GC + GDC \quad (13)$$

де $G = \frac{\langle X^{\tilde{1}\tilde{1}} - X^{11} \rangle}{i\omega_n + \lambda_1 - \lambda_1 + \Delta - A \langle X^{\tilde{1}\tilde{1}} - X^{11} \rangle}$ - бозонна функція Гріна, A, B, C, D - багатопетлеві внески

(зокрема, $A = \frac{a}{1-c-d+cd-ab}$, де a, b, c, d - однопетлеві внески виду

$$a = \frac{-2 \sin^2 \phi_1 \cos^2 \phi_1}{N} \sum_k t_k^2 \frac{n(\varepsilon_{4\bar{1}}(\mathbf{k})) - n(\varepsilon_{41}(\mathbf{k}))}{i\omega_n + \varepsilon_{4\bar{1}}(\mathbf{k}) - \varepsilon_{41}(\mathbf{k})}, \text{ і т.п.,}$$

$$\Delta = \frac{2}{N} \sum_k t_k [n(\varepsilon_{41}(\mathbf{k})) \sin^2 \phi_1 - n(\varepsilon_{4\bar{1}}(\mathbf{k})) \cos^2 \phi_1].$$

Встановлено, що в спектрі комбінаційного розсіяння при $T=0$ можуть бути присутні дві компоненти: некогерентний внесок (смуга шириною $\delta\omega = |\cos^2 \phi_1 - n/2| \frac{4(1-n)}{2-n} W$), що пов'язаний з міжзонними переходами (між електронними підзонами ε_{41} та $\varepsilon_{4\bar{1}}$, які достатньо віддалені від інших підзон при сильній взаємодії) та когерентний внесок (дельта-пік), який має псевдоспінове походження та пов'язаний із колективною динамікою псевдоспінів; при цьому ефективна взаємодія між псевдоспінами формується завдяки зонним електронам. Це проілюстровано на рис. 6. При підвищенні температури некогерентна компонента стає ширшою і перекриває дельта-пік (при малих концентраціях таке перекриття може відбутися вже і при $T=0$). Спектри розсіяння для zz та $xx+yy$ поляризацій мають подібну структуру, при цьому відношення інтенсивностей

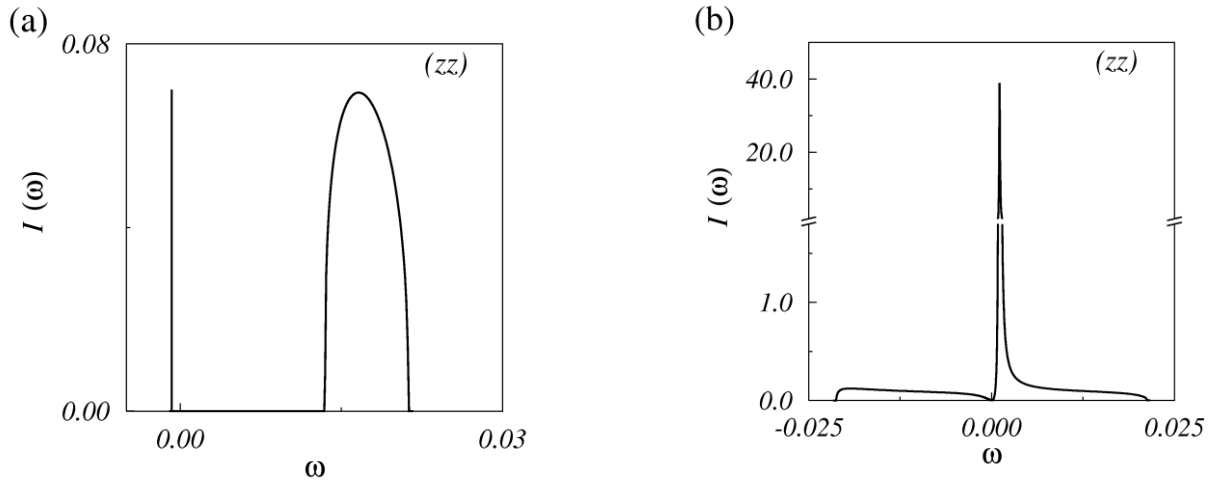


Рис. 6. Інтенсивність комбінаційного розсіяння для випадку zz поляризації (приведена в довільних одиницях), $W=0.1$, $n=0.9$, $h=0.16$, $\Omega=0.26$, $T=0$ (а), $T=0.015$ (б), частота є зсунутою: $\omega = \omega_2 - \omega_1 + \sqrt{h^2 + \Omega^2}$.

розсіяння для цих випадків є таким: $\frac{I^{zz}}{I^{xx+yy}} = \left(\frac{d_s}{2e}\right)^4 \frac{4\omega^2 \sin^2 4\phi_1 \Im\langle\langle X^{1\bar{1}} | X^{\bar{1}1} \rangle\rangle}{N \Im\langle\langle \sum_{k\sigma} \gamma_k c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} | \sum_{q\sigma'} \gamma_q c_{q\sigma}^+ c_{q\sigma'} \rangle\rangle}$, і, як показують

числові оцінки, інтенсивність для $xx+yy$ поляризації є меншою ніж для zz поляризації (це,

зокрема, пов'язано із тим, що електронні підзони розщеплені, $\sqrt{h^2 + \Omega^2} > W$). Цьому також сприяє той факт, що в однопетловому наближенні має місце підсилення внесків до zz розсіяння за рахунок максимуму (логарифмічної особливості у двовимірному випадку) густини електронних станів ($\Im b$ містить складову $\sim \rho(t^*)\delta n$; $\delta n = n(\varepsilon_{41}(t^*)) - n(\varepsilon_{41}(t^*))$, $t^* = \frac{\omega_2 - \omega_1 + \sqrt{h^2 + \Omega^2}}{n/2 - \cos^2 \phi_1}$), у той же час як для $xx+yy$ розсіяння внаслідок присутності додаткового множника t^{*2} ($\Im a \sim t^{*2} \rho(t^*)\delta n$) відбувається значна компенсація цього ефекту і однопетлові внески сильно послаблюються.

Для випадку слабкого псевдоспін-електронного зв'язку при відсутності одновузлової взаємодії між електронами отримано вираз для оператора поляризованості шляхом розщеплення "неусереднених" функцій Гріна вищих порядків. Відповідні корелятори типу $\langle S^z S^z \rangle$ розраховано в УНХФ за схемою, викладеною в розділі 2. Встановлено, що при $q \rightarrow 0$ в спектрі розсіяння будуть присутні внески, пов'язані із псевдоспін-хвильовими збудженнями, перенормованими за рахунок взаємодії з електронами. Для спектру таких збуджень при $T \rightarrow 0$ для випадку майже заповненої зони отримано аналітичний вираз

$$\omega_{ps} \approx \lambda + g^2 \sin^2 \theta \langle \sigma^z \rangle_0 \frac{k^{*2} t q^2}{2\pi\lambda^2} \quad (\omega > 2tk^*q + q^2t), \quad k^* = \sqrt{\frac{W + g\eta - \mu}{t}}. \quad (14)$$

Крім цього, у частотному діапазоні $-2tk^*q + q^2t < \omega < 2tk^*q + q^2t$ існує неперервний спектр електронних збуджень.

На основі розрахованих спектрів КР розглянено можливість інтерпретації експериментів по розсіянню світла у кристалах типу $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ (йде мова про спектри, пов'язані з коливаннями апексного кисню, де відзначається складна структура спектрів та залежність положення піку від ступеня легування Пієв М.Н., Наджієв В.Г., Іванов В.Г. // Journ. Ram. Spectr, 1996, **27**). У випадку сильної взаємодії зсув піку в спектрі пов'язується з залежністю від легування (зміни параметра δ) параметра асиметрії h локального потенціалу, в той час як при слабкій взаємодії положення піку змінюється при зміні концентрації n .

Основні результати та висновки.

1. Поширено метод узагальненого наближення хаотичних фаз на випадок ПЕМ з тунелюванням при слабкій взаємодії між електронною та псевдоспіновою підсистемами та при відсутності прямої взаємодії між електронами. Ефективна взаємодія між електронами формується кумулянтами та бозонними функціями Гріна. У цьому наближенні розраховано ізотермічну та

ізолювану діелектричні сприйнятливості. Встановлено, що згадані сприйнятливості у статичній границі не співпадають, що є свідченням неергодичності ПЕМ.

2. Виявлено, що у системі присутня нестійкість щодо виникнення зарядовпорядкованого стану з різними значеннями вектора модуляції $\mathbf{q} = (q, q)$. Показано, що при знаходженні хімічного потенціалу μ поблизу центру електронної зони може виникнути нестійкість щодо переходу у фазу з подвійною модуляцією періоду ґратки ($q = \pi$), при проміжних значеннях хімічного потенціалу можливим є перехід у фазу з неспівмірною модуляцією, якщо ж μ знаходиться поблизу країв зони, то $q = 0$.
3. На основі аналізу поведінки статичної сприйнятливості в надпровідному каналі при відмінному від нуля параметрі тунелювання виявлено, що надпровідний стан реалізується при розташуванні хімічного потенціалу безпосередньо біля країв зони; побудовано фазові діаграми температура нестійкості - хімічний потенціал. При зростанні константи тунелювання Ω звужується область простору параметрів, де мають місце фазові переходи у зарядовпорядкований стан, натомість зростає область такого простору, де відбувається перехід у надпровідний стан.
4. Проведений аналіз поведінки термодинамічних функцій спрощеної псевдоспін-електронної моделі зі слабкою взаємодією для однорідного випадку виявив у режимі фіксованого хімічного потенціалу (для значень μ поблизу країв зони) присутність у системі фазового переходу першого роду між двома однорідними фазами зі стрибками середнього значення електронної концентрації та псевдоспіна. При фіксованій електронній концентрації у системі відбувається фазове розшарування на дві однорідні області, зростання параметра тунелювання веде до пониження температури переходу та до звуження області фазового розшарування.
5. Знайдено термодинамічні функції при врахуванні можливої появи у системі фази з подвійною модуляцією періоду ґратки та досліджено їх температурні і польові залежності. Показано, що у режимі $\mu = const$ при заповненні зони, близькому до половинного, перехід між модульованою та однорідною фазами може бути як першого так і другого роду залежно від температури та значень параметрів моделі. Виявлено можливість виникнення фазового розшарування на однорідну фазу та фазу з подвійною модуляцією періоду ґратки. Показано, що не існує критичного значення Ω , при якому температура переходу стає рівною нулеві.
6. Для опису комбінаційного розсіяння світла в сильноскорельованих електронних системах застосовано підхід, при якому оператор поляризованості виражається через “неусереднену” функцію Гріна, побудовану на операторах дипольного моменту. Для випадку сильно зв'язаних електронів встановлено співвідношення даного підходу з методом, при якому явно

виділяються резонансні та нерезонансні електронні внески в розсіяння. Для таких систем розвинено метод побудови оператора поляризованості шляхом здійснення операторних розкладів за степенями параметра електронного переносу.

7. Досліджено спектр комбінаційного розсіяння світла для ПЕМ для випадків сильної та слабкої псевдоспін-електронної взаємодії. Розрахунок кореляційних функцій, що визначають переріз розсіяння, проведено в рамках схеми УНХФ. Для випадку сильних псевдоспін-електронної та одноузлової електронної взаємодій спектр КР в цілому є розщепленим, при цьому інтенсивності між лініями перерозподіляються зі зміною концентрації. Досліджено структуру однієї з ліній та виявлено присутність когерентного (вузький пік) та некогерентного внесків. При слабкому псевдоспін-електронному зв'язку та відсутності одноузлової електронної взаємодії спектр КР є нерозщепленим, однак положення лінії змінюється з концентрацією.

Результати дисертації опубліковано в таких роботах:

1. Stasyuk I.V., Mysakovych T.S. Raman scattering in pseudospin-electron model. // Journal of Physical Studies. - 1999. – **3**, № 3. - P. 344-358.
2. Stasyuk I.V., Mysakovych T.S. Raman light scattering for systems with strong short-range interaction. // Condens. Matter Phys. - 2000. – **3**, № 1. - P. 183-200.
3. Stasyuk I.V., Mysakovych T.S. Raman scattering in a locally anharmonic model with strong electron correlations. // Physica C. - 2000. – **341-348**. - P. 171-172.
4. Stasyuk I.V., Mysakovych T.S. Phase transitions in pseudospin-electron model at weak coupling. // Journal of Physical Studies. - 2001. – **5**, № 3/4. - P. 268-278.
5. Stasyuk I.V., Mysakovych T.S. Pseudospin-electron model at weak coupling. // Condens. Matter Phys. - 2002. – **5**, № 3. - P. 473-491.
6. Stasyuk I.V., Mysakovych T.S. Susceptibility and phase transitions in the pseudospin-electron model at weak coupling. // Acta Physica Polonica B. - 2003. – **34**, № 2. - P. 765-768.
7. Mysakovych T.S., Stasyuk I.V. Superconductivity in the pseudospin-electron model. // Ukr. J. Phys. - 2004. - **49**, № 6. - P. 607-616.
8. Mysakovych T.S., Stasyuk I.V. Raman light scattering in pseudospin-electron model at strong pseudospin-electron interaction. // Condens. Matter Phys. - 2004. - **7**, № 2. - P. 347-360.
9. Стасюк І.В., Мисакович Т.С. Комбінаційне розсіяння світла в системах з локально-ангармонічними елементами структури: Препр. / НАН України. Інститут фізики конденсованих систем; ІСМР-04-12U. – Львів: 2004. – 44 с.

10. Mysakovich T.S. Polarizability operator and Raman scattering intensity for systems with Hubbard interaction. // Intas-Ukraine Workshop on Condensed Matter Physics, Lviv, May 21-24, 1998. - P. 122.
11. Stasyuk I.V., Mysakovich T.S. Raman scattering in locally anharmonic systems with strong electron-vibrational interaction. // Proceeding of the XIV International School-Seminar "Spectroscopy of Molecules and Crystals", Odessa, June 7-12, 1999. - P. 122.
12. Mysakovich T.S. Thermodynamics and susceptibility of the pseudospin-electron model in the region of weak electron-phonon interaction. // Workshop "Modern Problems of Soft Matter Theory", Lviv, August 27-31, 2000, Book of Abstracts. - P. 152.
13. Stasyuk I.V., Mysakovich T.S. Raman Scattering in locally anharmonic model with strong electron correlation. // 6th International Conference on Materials and Mechanisms of Superconductivity and High-Temperature Superconductors, Houston, Texas USA, February 20-25, 2000, Abstracts. - P. IPO1-41.
14. Stasyuk I.V., Mysakovich T.S. Phase transitions in pseudospin-electron model at weak coupling. // Second International Pamporovo Workshop on Cooperative Phenomena in Condensed Matter, Pamporovo, Bulgaria, 28th July - 7th August, 2001, Abstracts, Programme, Information. - P. 22.
15. Stasyuk I.V., Mysakovich T.S. Thermodynamics of pseudospin-electron model at weak coupling. // The European Conference "Physics of Magnetism'02", Poznan, Poland, July 1-5, 2002, Abstracts. - P. 39.
16. Stasyuk I.V., Mysakovich T.S. Susceptibility and phase transitions in pseudospin-electron model at weak coupling. // International Conference on Strongly Correlated Electron Systems, Cracow, Poland, July 10-13, 2002, Book of Abstracts. - P. 226.
17. Стасюк І.В., Мисакович Т.С. Надпровідність в псевдоспін-електронній моделі. // IV Міжнародна школа-конференція "Актуальні проблеми фізики напівпровідників", Дрогобич, 24-27 червня 2003, Тези доповідей. - С. 240.
18. Stasyuk I.V., Mysakovich T.S. Influence of tunneling splitting on thermodynamics and dynamics of pseudospin-electron model. // The 7th International Conference on Spectroscopies in Novel Superconductors, Sitges, Spain, July 11-16, 2004, Program & Abstract Book. – P. P187.

Мисакович Т.С. Дослідження фазових переходів та комбінаційного розсіяння в локально-ангармонічних системах з сильними електронними кореляціями. — 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, 2005.

Дисертаційна робота присвячена теоретичному дослідженню термодинаміки та динаміки сильноскорельованих систем з локально-ангармонічними елементами структури в рамках псевдоспін-електронної моделі з тунелюванням. Проаналізовано можливість переходу в зарядовопорядковані стани з співмірною та неспівмірною модуляцією для випадку слабого псевдоспін-електронного зв'язку при відсутності електронної одновузлової взаємодії. Встановлено, що при далекому від половинного заповненні має місце перехід до надпровідного стану. В режимі постійної електронної концентрації досліджено нестійкості системи, пов'язані з фазовим розшаруванням. Досліджено вплив тунельного розщеплення рівнів на фазові переходи. Розвинено мікроскопічну схему для опису комбінаційного розсіяння світла в сильноскорельованих електронних системах. Для випадку сильних псевдоспін-електронної та електронної одновузлової взаємодій встановлено присутність в спектрі когерентного та некогерентного внесків. В рамках узагальненого наближення хаотичних фаз досліджено спектр псевдоспін-хвильових збуджень.

Ключові слова: *електронна кореляція, псевдоспін-електронна взаємодія, зарядовопорядковані стани, фазові переходи та розшарування, комбінаційне розсіяння, ангармонічні системи.*

Мисакович Т.С. Исследование фазовых переходов и комбинационного рассеяния в локально-ангармонических системах с сильными электронными корреляциями. — 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, 2005.

Диссертационная работа посвящена теоретическому исследованию термодинамики и динамики сильнокоррелированных систем с локально-ангармоническими элементами структуры в рамках псевдоспін-електронной модели с тунелированием. Проанализировано возможность перехода в зарядоупорядоченные состояния с соразмерной и несоразмерной модуляцией для случая слабой псевдоспін-електронной связи при отсутствии электронного одновузлового взаимодействия. Установлено, что при далеком от половинного заполнении имеет место переход в

сверхпроводящее состояние. В режиме постоянной электронной концентрации исследовано неустойчивости системы, связанные с фазовым расслоением. Исследовано влияние туннельного расщепления уровней на фазовые переходы. Развито микроскопическую схему для описания комбинационного рассеяния света в сильнокоррелированных электронных системах. Для случая сильных псевдоспин-электронного и электронного одноузловых взаимодействий установлено присутствие в спектре когерентного и некогерентного вкладов. В рамках обобщенного приближения хаотических фаз исследовано спектр псевдоспин-волновых возбуждений.

Ключевые слова: электронная корреляция, псевдоспин-электронное взаимодействие, зарядоупорядоченные состояния, фазовые переходы и расслоение, комбинационное рассеяние, ангармонические системы.

Mysakovich T.S. Investigation of phase transitions and Raman scattering in locally anharmonic systems with strong electron correlations. — Manuscript.

Thesis for the defending of the scientific degree of candidate of physical and mathematical sciences, speciality 01.04.02 — theoretical physics. Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine, Lviv, 2005.

The thesis is devoted to the theoretical studies of thermodynamics and dynamics of systems with locally anharmonic structure elements in the framework of the pseudospin-electron model (PEM) with tunneling splitting of the two lowest energy levels.

Applying the generalized random phase approximation (GRPA) for the case of the weak pseudospin-electron coupling in the simplified PEM (the electron single-site interaction is not taken into account), the expression for the dielectric susceptibility is obtained and the possibility of transitions to charge-density-wave (CDW)-ordered states is revealed. It is shown that the system undergoes the phase transition to the chessboard phase when the chemical potential μ is placed near the band center, at the intermediate values of μ the transition to the phase with incommensurate modulation of electron concentration and pseudospin mean value takes place and when the chemical potential is placed closer to the band edges the transition between uniform phases is realized. Analyzing the behavior of static susceptibility in superconducting channel it is shown that the transition to the superconducting state can take place when the chemical potential is immediately adjacent to the band edges.

The phase transitions between uniform phases (with jumps of the electron concentration n and the mean value of pseudospin $\langle S^z \rangle$) are of the first order, while the transition between uniform and chessboard phases can be of the first or second order depending on the values of the model parameters. In

the regime $n = const$ the possibility of the phase separation into two uniform phases or into uniform and chessboard phase is revealed. The increase of the parameter of the tunneling splitting Ω leads to the decrease of the temperature of transitions, to the narrowing of the region of existence of CDW-ordered states and to the broadening of the superconducting state existence region.

The microscopic approach is used to calculate the cross-section of Raman scattering in strongly correlated electron systems. The relation of this method with the standard one (when the resonant and nonresonant contributions are separated) is established. To construct the polarizability operator the method of “unaveraged” Green’s functions is used. For the case of strong pseudospin-electron coupling the operator expansion is applied; the electron transfer plays the role of the formal expansion parameter. For the case of weak interaction the procedure of decoupling of Green’s functions is applied. The presence of the coherent (in the form of narrow peak) and incoherent contributions in Raman spectrum is established for the case of strong pseudospin-electron and electron single-site coupling. The spectrum of pseudospin-wave excitations is investigated in the framework of GRPA.

On the basis of obtained results the microscopic origin of tendency to phase separation as well as doping dependence of Raman spectra in high- T_c superconducting systems is considered.

Key words: *electron correlation, pseudospin-electron interaction, charge-density-wave-ordered states, phase transitions and separation, Raman scattering, anharmonic systems.*