

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ІНСТИТУТ ФІЗИКИ КОНДЕНСОВАНИХ СИСТЕМ

ДУБЛЕНИЧ Юрій Ігорович



УДК 537.9, 537.622

**ФАЗОВА ПОВЕДІНКА
ДЕЯКИХ ПСЕВДОСПІНОВИХ ТА
ПСЕВДОСПІН-ЕЛЕКТРОННИХ МОДЕЛЕЙ**

01.04.02 – теоретична фізика

Автореферат дисертації на здобуття наукового ступеня
кандидата фізико-математичних наук

Львів – 2021

Дисертацією є рукопис.

Робота виконана 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 Національної академії наук України (м. Львів), головний науковий співробітник відділу квантової статистики

Офіційні опоненти: доктор фізико-математичних наук, професор **Лукіянець Богдан Антонович**, Національний університет «Львівська політехніка» (м. Львів), професор кафедри прикладної фізики і наноматеріалознавства;

доктор фізико-математичних наук, професор **Ткачук Володимир Михайлович**, Львівський національний університет імені Івана Франка (м. Львів), завідувач кафедри теоретичної фізики.

Захист відбудеться “28” квітня 2021 року о 15 год. 30 хв. 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 ознайомитися у науковій бібліотеці Інституту фізики конденсованих систем НАН України за адресою:
79026 м. Львів, вул. Козельницька, 4.

Автореферат дисертації розісланий “26” березня 2021 року.

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



А.М. Швайка

Актуальність теми. Дослідження фазових перетворень у різноманітних фізичних системах вже довгий час є одним із пріоритетних завдань фізики. Теорія фазових перетворень охоплює величезну різноманітність фізичних об'єктів і явищ. Мікроскопічні теоретичні моделі, які описуються ці системи, можуть містити як неперервні, так і дискретні величини. До останніх відносяться, приміром, ґраткові спінові моделі Ізинґового типу, в яких спінові змінні у вузлах ґратки набувають дискретних значень. Саме такі моделі й розглянуто в дисертації. Спінові моделі вперше виникли в теорії магнетизму, однак згодом їх стали використовувати й у багатьох інших галузях фізики, називаючи псевдоспіновими. Попри те, що в дисертації розглянуто різні об'єкти – ланцюжки апексних атомів кисню у високотемпературному надпровідникові $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$, шаруваті інтеркальовані кристали, двовимірні магнетики, сегнетоелектрики тощо, всіх їх об'єднує те, що їхню фазову поведінку можна описати спіновими (псевдоспіновими) або ж псевдоспін-електронними моделями. Однак застосування цих моделей не обмежується розглянутими в дисертації об'єктами. Наприклад, діаграми основного стану узагальненої моделі Блюма-Емері-Гріффітса на різних ґратках будуть корисними всім, хто матиме справу з фізичними системами, що описуються такою моделлю. Псевдоспін-електронні моделі складні і досі недостатньо ще вивчені, тому заслуговує на увагу розглянута в дисертації спрощена модель інтеркальованого шаруватого кристалу, в якій вплив електронної підсистеми можна врахувати точно. Розроблену в останньому розділі оригінальну методику дослідження фазової поведінки спінових моделей в наближенні середнього поля можна використати в інших подібних задачах. Про актуальність дослідження основних станів системи Гайзенбергових класичних спінів на анізотропній трикутній ґратці свідчить вже те, що відповідна стаття опублікована у “Physical Review B (Rapid Communications)” і процитована в огляді в “Review of Modern Physics”.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами і темами. Дисертаційна робота виконувалась в Інституті фізики конденсованих систем НАН України згідно з планами робіт за темами: “Термодинаміка та кінетика псевдоспін-електронних моделей локально ангармонічних кристалічних і молекулярних систем з сильними хаббардівськими кореляціями” (1999-2001 рр., шифр теми БТ 00199, номер держреєстрації 0199U000670); “Дослідження колективних іонних та електрон-іонних процесів у твердих тілах на основі ферміонних ґраткових моделей” (2002-2004 рр., шифр теми БТ 00602, номер держреєстрації 0102U000217); “Розвиток аналітичних методів теорії енергетичного спектру та динаміки сильнокорельованих систем частинок” (2005-2007 рр., номер держреєстрації 0105U002085); “Моделювання фізичних властивостей квантових ґраткових систем з багаточастинковими кореляціями” (2008-2012 рр.); “Квантові багаточастинкові ґраткові системи: динамічний відгук і ефекти сильних кореляцій” (2013-2017 рр., номер держреєстрації 0112U007761), “Сильні кореляції і конкуренції взаємодій у класичних і квантових ґраткових системах різної вимірності” (2018-2022 рр., номер держреєстрації 0118U003010).

Мета дисертаційної роботи — вивчення фазової поведінки деяких псевдоспінних та псевдоспін-електронних моделей і застосування їх до опису фазових перетворень в інтеркальованих кристалах і сегнетоелектриках. У роботі було розглянуто такі задачі:

- дослідити вплив тунелювання на фазові переходи першого роду в псевдоспін-електронній моделі, яка описує фазову поведінку апексних атомів кисню у високотемпературних надпровідниках типу $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$; вивчити коливні спектри ланцюжків скінченної довжини цих атомів,
- побудувати діаграми основних станів узагальненої моделі Блюма-Емері-Гріффітса на нефрустрованих ґратках, а також на трикутній ґратці та ґратці кагоме;
- дослідити конфігурації основного стану для системи класичних Гайзенбергових спінів на анізотропній трикутній ґратці,
- у наближенні середнього поля дослідити фазову поведінку псевдоспін-електронної моделі на основі спінової моделі Блюма-Емері-Гріффітса і проаналізувати вплив на цю поведінку електронної підсистеми,
- у наближенні середнього поля дослідити фазову поведінку моделі Міцуї у теорії сегнетоелектриків.

Об’єктом дослідження дисертаційної роботи є ланцюжки апексних атомів кисню у високотемпературних надпровідниках типу $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$, інтеркальовані шаруваті кристали, сегнетоелектрики, магнетики з нефрустрованими ґратками, а також трикутною ґраткою і ґраткою кагоме.

Предметом дослідження дисертаційної роботи є фазові діаграми псевдоспін-електронних моделей і моделі Міцуї у псевдоспінному формулюванні, діаграми основного стану моделей Ізинґового типу на нефрустрованих ґратках, а також трикутній ґратці та ґратці кагоме, упорядкування системи класичних Гайзенбергових спінів на анізотропній трикутній ґратці.

Методи дослідження. Застосовано як аналітичні так і числові, як точні (метод точної діагоналізації), так і наближені (метод середнього поля) методи досліджень.

Наукова новизна одержаних результатів. Усі результати, описані у дисертації — нові. Зокрема, вперше показано, що поперечне поле (тунелювання) у псевдоспін-електронній моделі не тільки виконує роль “квантової температури”, але й призводить до виникнення фазових переходів першого роду, які існують, якою б великою не була величина поперечного поля.

У дисертації вперше систематично досліджено основні стани узагальненої моделі Блюма-Емері-Гріффітса на нефрустрованих ґратках, а також на трикутній ґратці та ґратці кагоме. Також вперше розглянуто псевдоспін-електронну модель на основі спінової моделі зі спіном $S = 1$ і досліджено вплив електронної підсистеми на фазову поведінку такої моделі.

Можна вказати на кілька головних аспектів **практичного і наукового значення одержаних результатів**. У роботах, представлених у дисертації, розвинуто техніку дослідження фазової поведінки класичних та кванто-

вих псевдоспінових та псевдоспін-електронних моделей, яку можна використовувати для дослідження інших моделей такого типу. У дисертації зокрема показано, що тунелювання в ангармонічних потенціальних ямах призводить до виникнення фазових переходів першого роду. Цей результат має важливе значення, бо спонукає до пошуків фазових переходів такої природи в інших системах з тунелюванням. Діаграми основного стану для узагальненої моделі Блюма-Емері-Гріффітса на різного типу ґратках практично важливі, тому що цю модель використовують і будуть використовувати для опису різних фізичних явищ. Доказом тому є те, що стаття, в якій вони наведені, має більше десяти цитувань, в тому числі кілька за останні роки.

Особистий внесок здобувача. Завдання, висвітлені в усіх розділах дисертації, крім третього, сформулював науковий керівник дисертанта член-кореспондент НАН України доктор фіз.-мат. наук професор І. В. Стасюк. Все решта, окрім матеріялу, викладеного у статті [1], — особистий внесок здобувача. У статті [1] здобувач обчислив спектри та інтенсивності переходів.

Апробація роботи. Результати дисертації були оприлюднені на таких конференціях:

The 18-th IUPAP international conference on statistical physics, Berlin, August 2–8, 1992,

Workshop “Modern problems of soft matter theory”, Lviv, August 27–31, 2000,

“Dimensionality Effects and Non-linearity in Ferroics”, Lviv, October 19–22, 2004,

“Statistical Physics 2005: Modern Problems and New Applications”, Lviv, August 28–30, 2005,

“VIII Ukrainian-Polish and III East-European Meeting on Ferroelectrics Physics”, Lviv, September 4–7, 2006,

“Різдвяні дискусії”, Львів, 10–11 січня 2019, а також на семінарах ІФКС НАН України.

Результати, викладені в дисертації, **опубліковані** в шести статтях і одному препринті, а також у шести тезах конференцій.

Структура та обсяг дисертації. Дисертація складається зі вступу, розділу з оглядом літератури та чотирьох основних розділів, де викладено результати досліджень дисертанта, а також висновків та списку використаних джерел. Робота викладена на 119 сторінках (разом з літературою і додатками — 129 сторінок), бібліографічний список містить 70 найменувань публікацій у вітчизняних та закордонних виданнях.

ЗМІСТ РОБОТИ

У **вступі** висвітлено актуальність обраної теми, сформульовано мету і завдання дослідження, відзначено наукову новизну і практичне значення одержаних результатів, визначено особистий внесок здобувача та наведено інформацію щодо апробації результатів дисертації.

У **першому розділі** наведено стислий огляд літератури про ланцюжки апексних йонів кисню у високотемпературних надпровідниках типу $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$, вказано зокрема статті Мюллера, де запропоновано псевдоспіновий формалізм опису їхньої поведінки.

Коротко описано історію дослідження й використання моделі Ізинґового типу зі спіном $S = 1$, так званої моделі Блюма-Емері-Гріффітса, і наголошено на відсутності (до нашої публікації) ґрунтовних робіт з основних станів цієї моделі на різного типу ґратках. Наведено стислий опис історії виникнення ідеї про спінову рідину, вказано статті, де йдеться про її існування навіть у сполуках зі спіном $S = 1$, і пов'язано з тими сполуками проблему основних станів класичних Гайзенбергових спінових моделей на анізотропній трикутній ґратці.

Наведено невеликий огляд робіт з інтеркаляції в шаруваті кристали, зокрема ті статті, де йдеться про інтеркаляцію частинок, що можуть перебувати у двох різних станах на вузлі, а отже описуються моделями з псевдоспіном $S = 1$.

Завершує огляд літератури історія появи й дослідження псевдоспінової моделі Міцуї, відомої у теорії сегнетоелектриків.

У **другому розділі** розглянуто псевдоспін-електронну модель з поперечним полем, яка описує поведінку ланцюжків апексних йонів кисню у високотемпературному надпровідникові $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$. Вона має вигляд

$$H = \sum_i H_i - \frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} S_i^z S_j^z, \quad (1)$$

де

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

однокомірковий гамільтоніан. Тут J_{ij} – параметр прямої взаємодії між псевдоспінами S_i^z та S_j^z , U – Хаббардова кореляція, μ – хемічний потенціал, g – константа псевдоспін-електронної взаємодії, h – поздовжнє зовнішнє поле, або асиметрія локального ангармонічного потенціалу, Ω – поперечне поле.

У наближенні середнього поля гамільтоніан має вигляд:

$$H = \sum_i \tilde{H}_i + \frac{N}{2} J \eta^2, \quad (3)$$

де

$$\begin{aligned} \tilde{H}_i &= U n_{i\downarrow} n_{i\uparrow} - \mu(n_{i\downarrow} + n_{i\uparrow}) + g(n_{i\downarrow} + n_{i\uparrow}) - (h + J\eta) S_i^z - \Omega S_i^x, \\ J &= \sum_i J_{ij} = \sum_j J_{ij}, \quad \eta = \langle S_i^z \rangle. \end{aligned} \quad (4)$$

Вектори $|n_{i\uparrow}, n_{i\downarrow}, S_i^z\rangle$ утворюють повну базу для гамільтоніяна $\tilde{H}_i$:

$$\begin{aligned} |1\rangle &= |0, 0, 1/2\rangle, & |\tilde{1}\rangle &= |0, 0, -1/2\rangle, \\ |2\rangle &= |1, 1, 1/2\rangle, & |\tilde{2}\rangle &= |1, 1, -1/2\rangle, \\ |3\rangle &= |0, 1, 1/2\rangle, & |\tilde{3}\rangle &= |0, 1, -1/2\rangle, \\ |4\rangle &= |1, 0, 1/2\rangle, & |\tilde{4}\rangle &= |1, 0, -1/2\rangle. \end{aligned} \quad (5)$$

У цій базі гамільтоніан $\tilde{H}_i$ недіагональний, але легко перейти до бази, в якій він буде діагональним. У результаті одержимо такий набір власних значень:

$$\begin{aligned} \lambda_{1,\tilde{1}} &= \mp \frac{1}{2} \sqrt{\tilde{h}^2 + \Omega^2}, \\ \lambda_{2,\tilde{2}} &= -2\mu + U \mp \frac{1}{2} \sqrt{(\tilde{h} - 2g)^2 + \Omega^2}, \\ \lambda_{3,\tilde{3}} &= -\mu \mp \frac{1}{2} \sqrt{(\tilde{h} - g)^2 + \Omega^2} = \lambda_{4,\tilde{4}}, \end{aligned} \quad (6)$$

де $\tilde{h} = h + J\eta$.

Статистична сума для однієї комірки

$$Z_i = \sum_r (e^{-\beta\lambda_r} + e^{-\beta\lambda_{\tilde{r}}}) e^{-\beta\frac{J\eta^2}{2}}. \quad (7)$$

Загальна статистична сума

$$Z = Z_i^N. \quad (8)$$

Термодинамічний потенціал на одну комірку

$$\omega = -\Theta \ln \sum_r (e^{-\beta\lambda_r} + e^{-\beta\lambda_{\tilde{r}}}) + \frac{1}{2} J\eta^2. \quad (9)$$

З умови рівноваги в режимі $\mu = \text{const}$

$$\left(\frac{\partial \omega}{\partial \eta} \right)_{T, \mu, h} = 0 \quad (10)$$

одержуємо рівняння для середнього значення η , що відіграє роль параметра порядку:

$$\begin{aligned} \eta = & \frac{1}{\sum_r (e^{-\beta\lambda_r} + e^{-\beta\lambda_{\tilde{r}}})} \left\{ \frac{\tilde{h}}{2\sqrt{\tilde{h}^2 + \Omega^2}} (e^{-\beta\lambda_1} - e^{-\beta\lambda_{\tilde{1}}}) + \right. \\ & \left. + \frac{\tilde{h} - 2g}{2\sqrt{(\tilde{h} - 2g)^2 + \Omega^2}} (e^{-\beta\lambda_2} - e^{-\beta\lambda_{\tilde{2}}}) + \frac{\tilde{h} - g}{\sqrt{(\tilde{h} - g)^2 + \Omega^2}} (e^{-\beta\lambda_3} - e^{-\beta\lambda_{\tilde{3}}}) \right\}. \end{aligned} \quad (11)$$

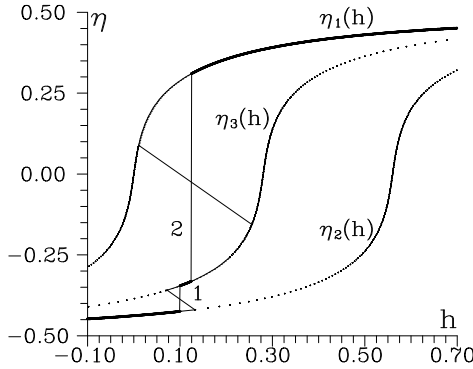


Рис. 1: Параметер порядку η як функція поля h (суцільна лінія) та криві $\eta_i(h)$ (пунктирні лінії). $T = 0$, $J = 1$, $\mu = -0.01$, $U = 0.1$, $g = 0.28$, $\Omega = 0.55$. Потовщені лінії відповідають термодинамічно стійким станам.

Середнє число електронів на комірку знайдемо, продиференціювавши за μ вираз (9):

$$n = 2 - 2 \cdot \frac{e^{-\beta\lambda_1} + e^{-\beta\lambda_{\bar{1}}} + e^{-\beta\lambda_3} + e^{-\beta\lambda_{\bar{3}}}}{\sum_r (e^{-\beta\lambda_r} + e^{-\beta\lambda_{\bar{r}}})}. \quad (12)$$

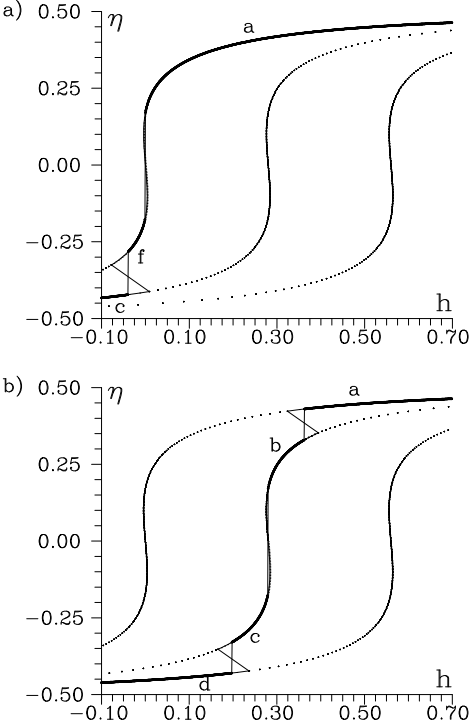


Рис. 2: Каскад фазових переходів. Потовщені лінії відповідають термодинамічно стійким станам, а пунктирними лініями зображено “незреалізовані” ділянки кривих $\eta_i(h)$. Буквами а, b, с, d та f позначено різні фази. а) $T = 0$, $J = 1$, $\mu = -0.106$, $U = 0.22$, $g = 0.28$, $\Omega = 0.47$; б) $T = 0$, $J = 1$, $\mu = 0.11$, $U = 0.22$, $g = 0.28$, $\Omega = 0.47$.

Вирази для середнього значення η та n дають змогу дослідити фазову поведінку моделі. Вона стає зрозуміла, коли спочатку розглянути фазові переходи в границі нульової температури в режимі $\mu = \text{const}$ (див. рис. 1), що можна зробити аналітично. Виявлено два типи фазових переходів першого роду: 1) фазові переходи з кривої 2 на криву 3 або з кривої 3 на криву 1 і 2) ті, які відповідають стрибкам із кривої 2 на криву 1 або відбуваються в межах однієї кривої. Перші зі збільшенням температури зникають значно швидше, ніж другі. Зі збільшенням Ω критична температура кожного переходу спадає. При $\Omega = J/2$ переходи першого типу зникають, а другого — залишаються, яким би великим не було Ω . Тож поперечне поле не просто зменшує критичну температуру фазових переходів першого роду, а й за певних μ і досить низької температури призводить до появи одного або й двох додаткових фазових переходів, які, на відміну від випадку $g = 0$, не зникають, яким би великим не було Ω . За нульової температури нестабільність щодо розшарування фаз існує не в обмеженій (як при $\Omega = 0$), а в усій області значень параметра асиметрії h .

Для аналізу динаміки ланцюжків CuO скінченної довжини в кристалах

типу $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ використано псевдоспінову модель без електронної підсистеми і поля h . Коливні спектри коротких ланцюжків знайдено як функції параметрів теорії. В низькоенергетичній частині спектру відбувається перехід з

основного стану; енергія цього переходу меншає збільшенням довжини ланцюжка. Обчислено інтенсивності переходів між рівнями.

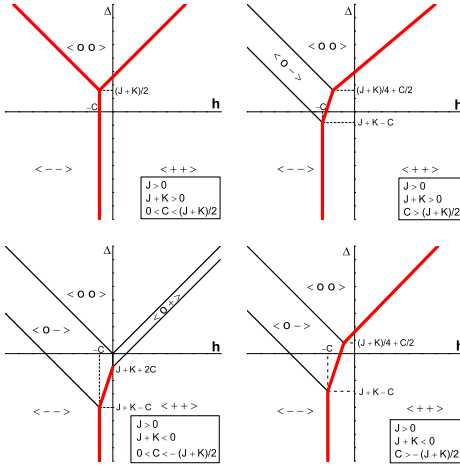


Рис. 3: Діяграми основного стану для моделі Ізинґа зі спіном $S = 1$ у випадку $J > 0$, $C > 0$ для нефрустрованих ґраток. Потовщені лінії відповідають фазовим переходам першого роду.

ками. Розглядаємо лише ґратки з однаковою кількістю зв'язків навколо кожного вузла. Одновузлову енергію розподіляємо рівномірно по z зв'язках, які оточують i -тий вузол, і замість гамільтоніану (13) розглядаємо гамільтоніан $H = zH^*$:

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - K \sum_{\langle ij \rangle} s_i^2 s_j^2 - C \sum_{\langle ij \rangle} (s_i^2 s_j + s_i s_j^2) + \sum_{\langle ij \rangle} [-h(s_i + s_j) + \Delta(s_i^2 + s_j^2)], \quad (14)$$

де запроваджено такі позначення: $H = zH^*$, $J = zJ^*$, $K = zK^*$ і $C = zC^*$. Діяграми основного стану однакові для обох гамільтоніанів.

Розглянувши двовузлові блоки та їхні енергії, легко будуюмо діяграми основного стану для нефрустрованих ґраток. Вони наведені на рис. 3 і 4.

Подібним чином, порівнюючи енергії тривузлових блоків, ми побудували діяграми основного стану для трикутної ґратки та ґратки кагоме.

У цьому розділі досліджено також основні стани системи класичних Гайзенбергових спінів на анізотропній трикутній ґратці. Гамільтоніан такої системи можна записати у вигляді суми за трикутними плакетками з класичними спінами (одичинними 3-векторами) у їхніх вершинах і парними лінійними (K , L

У третьому розділі йдеться про основні стани найзагальнішої моделі Ізинґа зі спіном $S = 1$. Побудовано фазові діяграми основного стану. Найзагальніший гамільтоніан моделі Ізинґа зі спіном $S = 1$ має вигляд

$$H^* = -J^* \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - K^* \sum_{\langle ij \rangle} s_i^2 s_j^2 - C^* \sum_{\langle ij \rangle} (s_i^2 s_j + s_i s_j^2) + \sum_i (-h s_i + \Delta s_i^2), \quad (13)$$

де s_i — спінова змінна на i -му вузлі — набуває значень $-1, 0, +1$, $\sum_{\langle ij \rangle}$ означає суму за парами найближчих сусідів, J^* , K^* і C^* характеризують білінійну, біквадратну та мішану взаємодії між найближчими сусідами, відповідно; h і Δ — “поля”.

У гамільтоніані (13) можна замінити суму за вузлами сумою за зв'яз-

і M) та біквдратичними (A , B і C) взаємодіями між спінами (в розрахунку на одну плакетку):

$$H = \sum_{\Delta_i} \left[K \vec{S}_{i1} \cdot \vec{S}_{i2} + L \vec{S}_{i2} \cdot \vec{S}_{i3} + M \vec{S}_{i1} \cdot \vec{S}_{i3} - A(\vec{S}_{i1} \cdot \vec{S}_{i2})^2 - B(\vec{S}_{i2} \cdot \vec{S}_{i3})^2 - C(\vec{S}_{i1} \cdot \vec{S}_{i3})^2 \right], \quad (15)$$

де $\vec{S}_{i1}$, $\vec{S}_{i2}$ і $\vec{S}_{i3}$ — спіни в трьох вершинах i -ї трикутної плакетки.

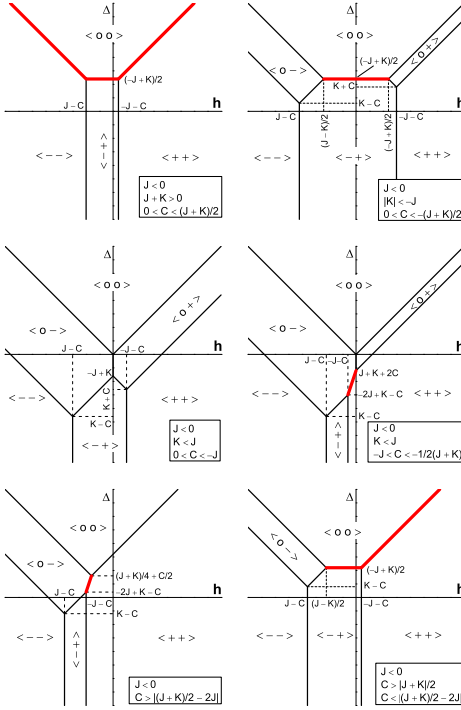


Рис. 4: Діяграми основного стану для моделі Ізинга зі спіном $S = 1$ у випадку $J < 0$, $C > 0$ для нефрустрованих графок. Потовщені лінії відповідають фазовим переходам першого роду.

Якщо мінімізація енергії плакетки призводить до трьох різних кутів між парами спінів у її вершинах, то існує три типи спінових упорядкування: звичайна спіральна конічна структура, а також дво- та чотири-підграткові спіральні конічні структури. Найцікавіша з них — чотири-підграткова структура, яка має вигляд вкладених одна в одну чотирьох звичайних спіральних структур (рис. 5). Подібну структуру спостерігали експериментально С. Накацуї та інші (Nakatsuji, S. et al. Spin Disorder on a Triangular Lattice // Science. — 2005. — Vol. 309. — P. 1697).

У четвертому розділі розглянуто псевдоспін-електронну модель інтеркаляції дипольних частинок у шаруваті кристали.

Гамільтоніян такої моделі можна записати, використавши псевдоспіновий формалізм:

$$H = H_s + H_{se} + H_e. \quad (16)$$

Тут

$$H_s = -\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} S_i^z S_j^z - \frac{1}{2} \sum_{ij} K_{ij} S_i^{z2} S_j^{z2} + \sum_i (-h S_i^z + E_0 S_i^{z2}) \quad (17)$$

— гамільтоніян псевдоспінової моделі з псевдоспіном $S = 1$ (гамільтоніян БЕГ). Його білінійний доданок описує залежну, а біквдратний — незалежну від

орієнтації ефективну взаємодію між псевдоспінами, тобто взаємодії диполь-диполь і заряд-заряд між інтеркальованими частинками. Вважатимемо, що обидві ці взаємодії мають характер притягання. $-hS_i^z$ — це енергія псевдоспіна у зовнішньому полі, а E_0 — однойонна анізотропія. $-E_0$ — це хемічний потенціал інтеркальованих частинок.

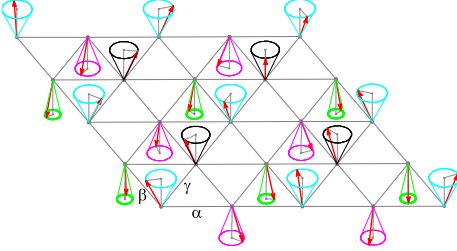


Рис. 5: Чотирипідграткова спінова конфігурація. У межах кожної підгратки спінова структура — звичайна спіральна конічна, але на трикутній ґратці з удвічі більшими сталими ґратки.

Електронну підсистему описує гамільтоніан H_e :

$$H_e = \frac{U}{2} \sum_i n_{ei}(n_{ei} - 1) - \mu \sum_i n_{ei}, \quad (18)$$

де U — Габбардова кореляція електронів на вузлі, а μ — хемічний потенціал електронів. Гамільтоніан H_{se} пов'язує псевдоспінову та електронну підсистему:

$$H_{se} = g \sum_i n_{ei} S_i^z + \rho \sum_i n_{ei} S_i^{z2}, \quad (19)$$

де g — залежна, а ρ — незалежна від орієнтації псевдоспіна енергія псевдоспін-електронної взаємодії. Гамільтоніан (16) можна записати у вигляді суми двовузлових та одновузлових гамільтоніанів:

$$H = \sum_{ij} H_{ij} + \sum_i H_i. \quad (20)$$

Запровадивши позначення

$$\begin{aligned} r &= 1 + e^{-\beta(2g+2\rho+U-2\mu)} + 2e^{-\beta(g+\rho-\mu)}, \\ t &= 1 + e^{-\beta(-2g+2\rho+U-2\mu)} + 2e^{-\beta(-g+\rho-\mu)}, \\ s &= 1 + e^{-\beta(U-2\mu)} + 2e^{\beta\mu}, \end{aligned} \quad (21)$$

$$\begin{aligned} \tilde{h} &= h + \frac{1}{2\beta} \ln \frac{r}{t} \\ &= h + \frac{1}{2\beta} \ln \frac{r}{s} - \frac{1}{2\beta} \ln \frac{t}{s}, \\ \tilde{E}_0 &= E_0 - \frac{1}{2\beta} \ln \frac{r}{t} - \frac{1}{\beta} \ln \frac{t}{s} \\ &= E_0 - \frac{1}{2\beta} \ln \frac{r}{s} - \frac{1}{2\beta} \ln \frac{t}{s}, \end{aligned} \quad (22)$$

великий термодинамічний потенціал системи на один вузол можна записати у вигляді:

$$\begin{aligned}\omega &= -\frac{1}{\beta N} \ln Z \\ &= -\frac{1}{\beta} \ln s - \frac{1}{\beta N} \ln \sum_{km} \left(\sum_{\langle km \rangle} e^{-\beta \sum_{ij} H_{ij}} \right) e^{-\beta \tilde{E}_0(k+m)} e^{\beta \tilde{h}(k-m)},\end{aligned}\quad (23)$$

де $\langle km \rangle$ означає, що підсумовування йде за станами з k і m псевдоспінами вгору і вниз відповідно.

Вираз для середнього числа електронів на вузол:

$$n_e = 2 - c_1(n + \eta) - c_2(n - \eta) - 2c_3(1 - n). \quad (24)$$

Тут запроваджено такі позначення:

$$\begin{aligned}n_e &= -\frac{\partial \omega}{\partial \mu}, \quad n = \langle S_i^z{}^2 \rangle = \frac{\partial \omega}{\partial \tilde{E}_0}, \quad \eta = \langle S_i^z \rangle = -\frac{\partial \omega}{\partial \tilde{h}}; \\ c_1 &= \frac{1 + e^{-\beta(g+\rho-\mu)}}{1 + e^{-\beta(2g+2\rho+U-2\mu)} + 2e^{-\beta(g+\rho-\mu)}}, \\ c_2 &= \frac{1 + e^{-\beta(-g+\rho-\mu)}}{1 + e^{-\beta(-2g+2\rho+U-2\mu)} + 2e^{-\beta(-g+\rho-\mu)}}, \\ c_3 &= \frac{1 + e^{\beta\mu}}{1 + e^{-\beta(U-2\mu)} + 2e^{\beta\mu}}.\end{aligned}\quad (25)$$

Рівняння (22) – (25) дають змогу дослідити фазову діаграму моделі (20). Вона звелася до моделі Блома-Емері-Гріффітса:

$$H_s = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i^z S_j^z - K \sum_{\langle ij \rangle} S_i^{z2} S_j^{z2} + \sum_i \left(-\tilde{h} S_i^z + \tilde{E}_0 S_i^{z2} \right), \quad (26)$$

де $\langle ij \rangle$ означає суму за парами найближчих сусідів, а J і K — відповідно білінійна та бікваратна взаємодії.

Цю модель ми дослідили точно для нульової температури і в наближенні середнього поля для відмінної від нуля температури. Знайшли мультикритичні точки та лінії на фазовій діаграмі. Побудували приклади фазових діаграм у координатах $(\tilde{h}, \tilde{E}_0, \theta)$, а також (h, E_0, θ) (рис. 6).

Основний результат наших досліджень полягає в тому, що за фіксованої температури електронна підсистема призводить до зміщення фазової діаграми в координатах (h, E_0) , але це зміщення, як видно з рівнянь (22), залежать не лише від параметрів електронної та псевдоспін-електронної взаємодій, а й від температури. Тому діаграма в координатах (h, E_0, θ) “викривлюється”. У

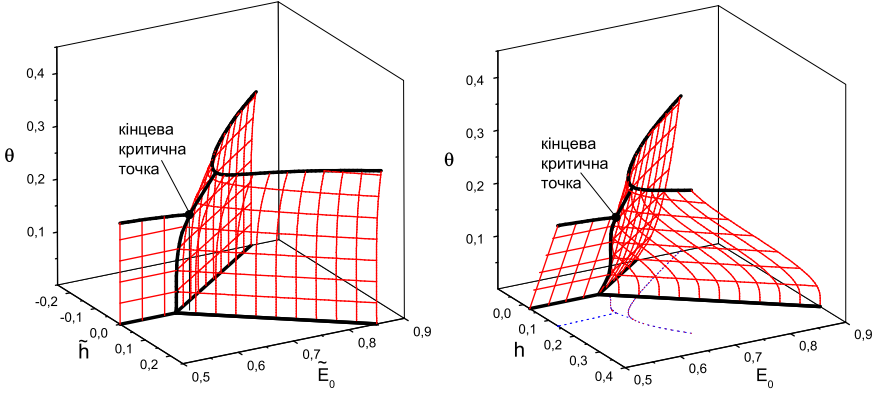


Рис. 6: Приклад фазової діаграми моделі БЕГ (зліва) та відповідної псевдоспін-електронної моделі (справа). $J = 0.2$, $K = 1.0$, $g = 1.15$, $\rho = 1.0$, $U = 0.2$, $\mu = -0.1$.

випадку фіксованого n_e і/або n відбувається розшарування на фази з різними концентраціями електронів і частинок.

У **п'ятому розділі** досліджено фазову поведінку моделі Міцуї, відомої в теорії сегнетоелектриків. Гамільтоніан моделі Міцуї (без зовнішнього поля) має вигляд

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} (S_i^z A S_j^z A + S_i^z B S_j^z B) - \sum_{ij} K_{ij} S_i^z A S_j^z B - \Delta \sum_i (S_i^z A - S_i^z B) - \Omega \sum_i (S_i^x A + S_i^x B). \quad (27)$$

Тут індекси A і B відповідають двом різним підґраткам, $S_i^{\alpha A}$ – α -компонента псевдоспіна на i -му вузлі підґратки A , J_{ij} – взаємодія між псевдоспинами однієї підґратки, K_{ij} – взаємодія між псевдоспинами різних підґраток, Δ – асиметрія ангармонічного потенціалу, поперечне поле Ω описує тунелювання між двома під'ямами двомінімумного потенціалу.

Заміна $S_i^z B \rightarrow -S_i^z B$, $K_{ij} \rightarrow -K_{ij}$ перетворює гамільтоніан (27) у гамільтоніан дво підґраткової моделі із поздовжнім полем Δ (однаковим на обох підґратках) та поперечним полем Ω . Тому обидві моделі еквівалентні.

В наближенні середнього поля гамільтоніан (27) має вигляд

$$H = \frac{N}{2} \left\{ K \eta_A \eta_B + \frac{J}{2} (\eta_A^2 + \eta_B^2) \right\} + \sum_i (H_i^A + H_i^B), \quad (28)$$

де запроваджені такі позначення:

$$H_i^A = -(\Delta + K \eta_B + J \eta_A) S_i^z A - \Omega S_i^x A, \quad (29)$$

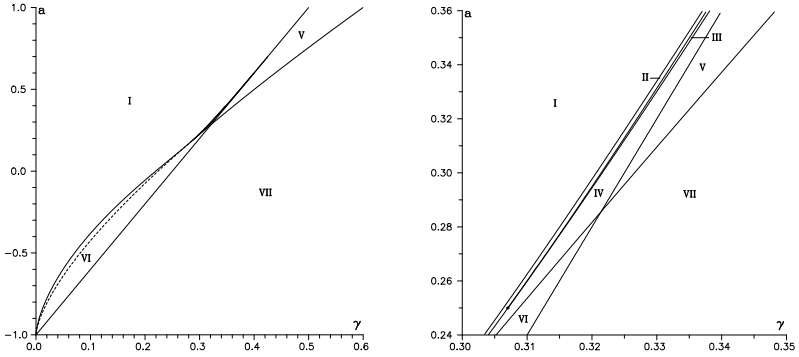


Рис. 7: Области існування сегнетофази (див. також наступний рисунок). Штриховану лінію – продовження лінії, яка обмежує область V – наведено тільки для порівняння з діаграмою із монографії В.Г. Вакса (Вакс В.Г. Введение в микроскопическую теорию сегнетоэлектриков. Москва: Наука, 1973).

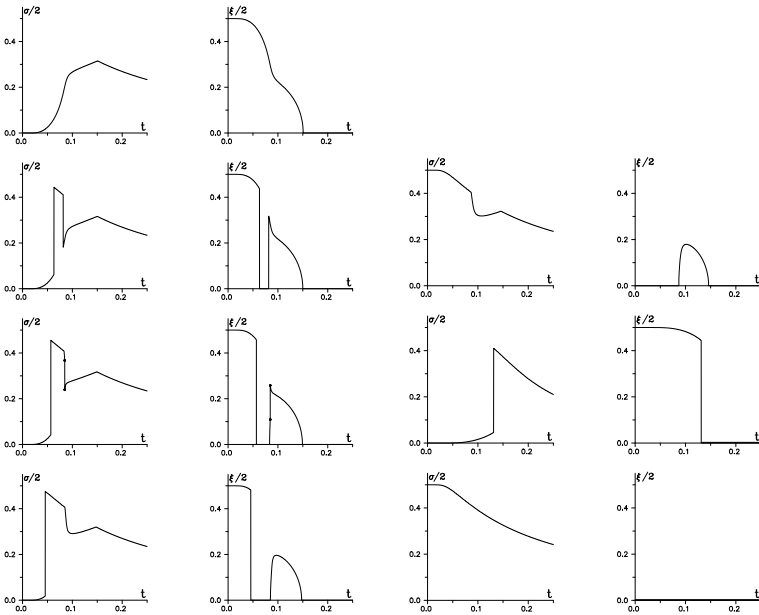


Рис. 8: Параметри сегнетоелектричного та антисегнетоелектричного впорядкування для різних областей існування сегнетофази. Зображено тільки термодинамічно стійкі стани. $a = 0.36$, далі по стрічках зверху вниз: I) $\gamma = 0.337$; II) $\gamma = 0.3375$; III) $\gamma = 0.338$; IV) $\gamma = 0.339$. V) $a = 0.36$, $\gamma = 0.34$; VI) $a = -0.4$, $\gamma = 0.14$; VII) $a = 0.36$, $\gamma = 0.35$. Для області III кружечками вказано фазовий перехід першого роду в межах сегнетофази.

$$H_i^B = -(-\Delta + K\eta_A + J\eta_B) S_i^{zB} - \Omega S_i^{xB}, \quad (30)$$

$$K = \sum_i K_{ij} = \sum_j K_{ij}, \quad J = \sum_i J_{ij} = \sum_j J_{ij}, \quad (31)$$

$\eta_A = \langle S_i^{zA} \rangle$, $\eta_B = \langle S_i^{zB} \rangle$ – середні значення псевдоспінів на підгратках, а N – загальна кількість псевдоспінів.

Зручно запровадити нові змінні: $\xi = \eta_A + \eta_B$ – параметр сегнетоелектричного впорядкування, та $\sigma = \eta_A - \eta_B$ – параметр антисегнетоелектричного впорядкування, а також такі позначення:

$$a = \frac{K - J}{K + J}, \quad \gamma = \frac{\Delta}{K + J}, \quad t = \frac{\theta}{K + J}, \quad \omega = \frac{\Omega}{K + J}, \quad f = \frac{F}{K + J}, \quad (32)$$

перейшовши таким чином до безрозмірних величин.

Рівняння самоузгодження для випадку $\omega = 0$ мають вигляд

$$e^{\xi/t} = \frac{(1 + \xi)^2 - \sigma^2}{(1 - \xi)^2 - \sigma^2}, \quad e^{-a\sigma/t} = e^{-2\gamma/t} \frac{(1 + \sigma)^2 - \xi^2}{(1 - \sigma)^2 - \xi^2}, \quad (33)$$

а вираз для вільної енергії на одну комірку такий:

$$f = \frac{1}{4} (\xi^2 - a\sigma^2) + \frac{t}{2} \ln\{[1 - (\xi + \sigma)^2] \times [1 - (\xi - \sigma)^2]\} - 2t \ln 2. \quad (34)$$

Рівняння самоузгодження та вираз для вільної енергії дають змогу дослідити фазові переходи першого і другого родів і побудувати фазову діаграму

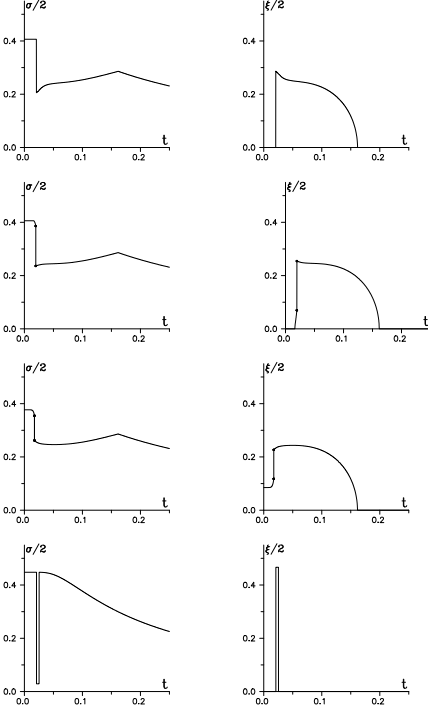


Рис. 9: Параметри сегнетоелектричного та антисегнетоелектричного впорядкування для різних областей існування сегнетофази. $\omega = 0.1$. Зображено тільки термодинамічно стійкі стани. По стрічках зверху вниз: VIII) $a = 0.65$, $\gamma = 0.4035$; IX) $a = 0.66$, $\gamma = 0.4065$; X) $a = 0.667$, $\gamma = 0.4085$; XI) $a = 0.2$, $\gamma = 0.2912765$. Кругечками вказано фазовий перехід першого роду в межах сегнетофази.

моделі Міцуї. Нетривіальна картина фазових переходів спостерігається тільки у випадку $K \geq 0, J \geq 0$, тому лише цей випадок розглянуто в дисертації. Досліджено, що в площині (γ, a) ($\gamma \geq 0, a \geq 0$) є сім областей з різними типами температурної поведінки параметрів ξ і σ . Ці області показано на рис. 7, а приклади температурної залежності параметрів порядку для кожної із областей наведено на рис. 8.

Знайдено також аналітичний вираз для трикритичної температури та умову її існування:

$$t_{tc} = \frac{1}{3} + \frac{1}{6(a-1)}, \quad a \leq \frac{1}{4}. \quad (35)$$

Аналогічне дослідження проведено для випадку $\omega \neq 0$ і виявлено ще чотири типи температурної поведінки параметрів порядку (див. рис. 9).

Основні результати та висновки

1. У наближенні середнього поля досліджено фазову поведінку псевдоспін-електронної моделі з прямою взаємодією псевдоспінів та поперечним полем Ω . Показано, що поперечне поле не просто зменшує критичну температуру фазових переходів першого роду, а й за певних значень хемічного потенціалу μ і досить низької температури приводить до виникнення одного або й двох додаткових фазових переходів, які, на відміну від випадку $g = 0$ (g – псевдоспін-електронна взаємодія), не зникають, яким би великим не було поздовжнє поле h . За нульової температури нестабільність щодо розшарування фаз існує не в обмеженій (як у випадку $\Omega = 0$), а в усій області значень параметра h . Псевдоспінова модель без електронної підсистеми і поля h дала змогу провести аналіз динаміки ланцюжків CuO скінченної довжини в кристалах типу $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$. Знайдено коливні спектри коротких ланцюжків і показано, що в низькоенергетичній частині спектру відбувається перехід з основного стану; енергія цього переходу меншає з більшанням довжини ланцюжка. Результати опубліковано у статтях [1,2].
2. Побудовано діаграми основного стану для узагальненої моделі Блюма-Емері-Ґріффітса на нефрустрованих ґратках та на двох фрустрованих: трикутній ґратці та ґратці кагоме. Зроблено аналіз основних станів на межах повновимірних областей і знайдено межі, де мають місце фазові переходи першого роду. Показано, що трикутна ґратка в більшій мірі “підтримує” фазові переходи першого роду, ніж ґратка кагоме. Результати опубліковано у статті [3] та препринті [7].
3. Показано, що сновний стан системи класичних спінів на анізотропній трикутній ґратці можна побудувати, мінімізуючи енергію взаємодії в межах однієї елементарної трикутної плакетки, якщо взаємодії між спінами не виходять за межі плакетки. Якщо усі три кути між парами спінів пла-

кетки різні, існує три різні типи глобальних структур основного стану. Найскладніший із них — несумірне спіральне чотирипід'раткове впорядкування. Подібний тип упорядкування спостерігали у сполуках NiGa_2S_4 та FeGa_2S_4 . Спіновий безлад у цих сполуках може бути результатом складної доменної структури, у якій є домени усіх трьох типів, бо усі ці структури основного стану мають однакову енергію. Результати опубліковано у статті [6].

4. Запропоновано псевдоспін-електронну модель на основі моделі БЕГ для опису інтеркаляції частинок у шаруваті кристали з двома станами частинки на вузлі. Завдяки одновузловому характеру електрон-електронної і псевдоспін-електронної взаємодії в моделі, вплив електронної підсистеми враховано точно. Поле в ефективній псевдоспіновій системі зміщене й залежить від температури та параметрів, пов'язаних з електронами. Для взаємодії найближчих сусідів побудовано точну фазову діаграму основних станів псевдоспінової системи, що дало змогу вивчити фазові переходи й розділення фаз у моделі за нульової температури, не використовуючи ніяких наближень. За фіксованої температури вплив електронів призводить до зміщення ліній співіснування фаз вздовж осей h та E_0 , тому поверхня співіснування фаз деформується, і якщо псевдоспін-електронна взаємодія відмінна від нуля, то фазова діаграма вже не симетрична відносно поля h . Розділення на фази з різною концентрацією частинок зумовлене сталістю числа електронів, які взаємодіють з частинками, навіть якщо число інтеркальованих частинок не фіксоване. Результати опубліковано у статті [4].
5. Встановлено взаємно однозначну відповідність між моделлю Міцуї і моделлю двоїд'раткового метамагнетика в зовнішньому полі. Вперше проведено повний аналіз фазових переходів у моделі Міцуї в наближенні середнього поля як за нульового, так і за відмінного від нуля поперечного поля Ω . Розроблено оригінальну методику такого аналізу. За $\Omega = 0$ знайдено аналітичний вираз для трикритичної температури й умову її існування. У цьому випадку існує сім різних типів температурної поведінки параметра порядку – поляризації. Їх кількість зростає за невеликого поперечного поля Ω , але, починаючи з деякого його значення, кількість типів температурної поведінки параметра порядку меншає, а за $\omega = \Omega/(K + J) > 1/2$ фазових переходів нема взагалі. За відмінного від нуля Ω фазові переходи другого роду можливі й за нульової температури, чого не може бути у випадку $\Omega = 0$. Максимальна кількість фазових переходів за $\Omega = 0$ – чотири (по два кожного роду), а за $\Omega \neq 0$ – п'ять (три першого і два другого роду). Результати опубліковано у статті [5].

Результати дисертації опубліковано в таких роботах:

1. Стасюк, И.В. О низкочастотной динамике цепочек CuO конечной длины в высокотемпературных сверхпроводниках типа $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ / И.В. Стасюк, С.С. Коцур, А.Л. Иванкив, Ю.И. Дубленич // Сверхпроводимость : физика, химия, техника. – 1992. – Т. 5, № 4. – С. 584–588.
Stasyuk, I.V. Low-frequency dynamic of CuO chains of finite length in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ high T_c superconductors / I.V. Stasyuk, S.S. Kotsur, A.L. Ivankiv, and Yu.I. Dublanych // Superconductivity. – 1992. – V. 5, no. 4. – P. 584–588.
2. Dublanych, Yu.I. Phase transitions and phase separations in a pseudospin-electron model with direct interaction between pseudospins and with transverse field / Yu.I. Dublanych // Condens. Matter Phys. – 2000. – Vol. 3, no. 4. – P. 815–825.
3. Dublanych, Yu.I. Exact ground-state diagrams for the generalized Blume-Emery-Griffiths model / Yu.I. Dublanych // Phys. Rev. B. – 2005. – Vol. 71, no. 1. – P. 012411 : 1–4.
4. Stasyuk, I.V. Phase transitions and phase separations in an $S = 1$ pseudospin-electron model : Application of the model to the intercalated crystals / I.V. Stasyuk, Yu.I. Dublanych // Phys. Rev. B. – 2005. – Vol. 72, no. 22. – P. 224209 : 1–13.
5. Dublanych, Yu.I. Phase transitions in the Mitsui model / Yu.I. Dublanych // Condens. Matter Phys. – 2011. – Vol. 14, no. 2. – P. 23603 : 1–20.
6. Dublanych, Yu.I. Ground states of a system of classical spins on an anisotropic triangular lattice and the spin-liquid problem in NiGa_2S_4 and FeGa_2S_4 / Yu.I. Dublanych // Phys. Rev. B. – 2017. – Vol. 96, no. 14. – P. 140401 : 1–4.
7. Дубленич, Ю.І. Діаграми основного стану узагальненої моделі Блюма-Емері-Гріффітса на нефрустрованих ґратках та на трикутній ґратці та ґратці кагоме / Дубленич Ю.І. // Львів, 2020. – 12 с. – (Препринт / Національна академія наук України. Інститут фізики конденсованих систем; ICMP-20-02U).
8. Stasyuk I.V. On the application of pseudo-spin models for the description of finite quasi one-dimensional systems / I.V. Stasyuk, A.L. Ivankiv, Yu.I. Dublanych // The 18-th IUPAP internation. conf. on statist. phys., Berlin, August 2–8, 1992. Book of Abstracts. – Berlin, 1992. – P. 220.
9. Dublanych, Yu.I. Phase transitions and phase separation in the pseudospin-electron model in transverse field with direct interaction between pseudospins / Yu.I. Dublanych // Workshop “Modern problems of soft matter theory”, Lviv, August 27–31, 2000. Book of Abstracts. – Lviv, 2000. – P. 124.
10. Dublanych, Yu.I. Phase transitions in the Mitsui model / Yu.I. Dublanych // Workshop “Dimensionality Effects and Non-linearity in Ferroids”, Lviv, October 19–22, 2004. Book of Abstracts. – Lviv, 2004. – P. 69.
11. Dublanych, Yu.I. Exact ground-state diagrams for the generalized Blume-

- Emery-Griffiths model / Yu.I. Dublenych // Statistical Physics 2005 : Modern Problems and New Applications, Lviv, August 28–30, 2005. Book of Abstracts. – Lviv : 2005. – P. 130.
12. Dublenych, Yu.I. Phase transitions and phase separations in an $S = 1/2$ pseudospin-electron model and ferroelectricity in intercalated compounds / Yu.I. Dublenych // VIII Ukrainian-Polish and III East-European Meeting on Ferroelectrics Physics, Lviv, September 4–7, 2006. Book of Abstracts. – Lviv, 2006. – P. 65.
13. Дубленич Ю.І. Упорядкування в системі класичних спінів на асиметричній трикутній ґратці та проблема спінової рідини у сполуках NiGa_2S_4 і FeGa_2S_4 / Дубленич Ю.І. // “Різдвяні дискусії”, Львів, 10–11 січня 2019. Програма і тези доповідей. – Львів, 2019. – С. 7.

АНОТАЦІЯ

Дубленич Ю.І. Фазова поведінка деяких псевдоспінових та псевдоспін-електронних моделей. — На правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.02 “Теоретична фізика” (104 — Фізика та астрономія). — Інститут фізики конденсованих систем НАН України, Львів, 2021.

Дисертаційна робота присвячена дослідженню фазової поведінки псевдоспінових та псевдоспін-електронних моделей, що описують ланцюжки алексних йонів кисню у високотемпературних надпровідниках типу $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$, шаруваті інтеркальовані сполуки та деякі сегнетоелектрики.

У наближенні середнього поля розглянуто псевдоспін-електронну модель ($S = 1/2$) з прямою взаємодією псевдоспінів та поперечним полем і виявлено фазові переходи першого роду двох різних типів. Спрощену псевдоспінову модель використано, щоб обчислити спектр ланцюжків CuO скінченної довжини та інтенсивності переходів між рівнями.

Побудовано фазові діаграми основного стану узагальненої моделі Блюма-Емері-Ґріффітса на нефрустрованих ґратках, трикутній ґратці та ґратці кагоме зі взаємодією найближчих сусідів. Досліджено основні стани системи класичних Гайзенбергових спінів на анізотропній трикутній ґратці і знайдено три типи спінових упорядкувань.

Псевдоспін-електронну модель на основі моделі Блюма-Емері-Ґріффітса застосовано до опису фазових переходів в інтеркалатах. Показано, що завдяки одновузловому характерові електрон-електронної та псевдоспін-електронної взаємодій, статистична сума моделі розбивається на добуток статистичних сум незалежних псевдоспінової та електронної підсистем.

Ключові слова: фазові переходи, розшарування фаз, інтеркаляція, модель Ізинґа, псевдоспін-електронна модель, основні стани.

АННОТАЦИЯ

Дубленич Ю.И. Фазовое поведение некоторых псевдоспиновых и псевдоспин-электронных моделей. — На правах рукописи.

Диссертация на соискание научной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 “Теоретическая физика” (104 — Физика и астрономия). — Институт физики конденсированных систем НАН Украины, Львов, 2021.

В приближении среднего поля рассмотрено псевдоспин-электронную модель ($S = 1/2$) с прямым взаимодействием псевдоспинов и поперечным полем и обнаружено фазовые переходы первого рода двух различных типов. Упрощенную псевдоспиновую модель использовано, чтобы вычислить спектр цепочек CuO конечной длины и интенсивности переходов между уровнями.

Построено фазовые диаграммы основного состояния обобщенной модели Блюма-Эмери-Гриффитса на нефрустрированных решетках, треугольной решетке и решетке КагOME со взаимодействием ближайших соседей. Исследованы основные состояния системы классических Гейзенберговских спинов на анизотропной треугольной решетке и найдено три типа спиновых упорядочений.

Псевдоспин-электронную модель на основе модели Блюма-Эмери-Гриффитса применено к описанию фазовых переходов в интеркалатах. Показано, что благодаря одноузельному характеру электрон-электронного и псевдоспин-электронного взаимодействий, статистическая сумма модели разбивается на произведение статистических сумм независимых псевдоспиновой и электронной подсистем.

Ключевые слова: фазовые переходы, расслоение фаз, интеркаляция, модель Изинга, псевдоспин-электронная модель, основные состояния.

ABSTRACT

Dublenych Yu.I. Phase behaviour of some pseudospin and pseudospin-electronic models. — Manuscript.

Thesis for the Degree of Doctor of Philosophy in Physics and Mathematics on the speciality 01.04.02 “Theoretical Physics” (104 — Physics and Astronomy). — Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine, Lviv, 2021.

The goal of the dissertation is to study phase transitions and phase separation in spin and pseudospin-electronic models describing behavior of chains of apex oxygen ions in high-temperature superconductors of the $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ type, layered intercalated compounds, and some ferroelectrics.

The pseudospin-electron model with a direct interaction between pseudospins and with a transverse field is considered in the mean-field approximation. In the absence of electron transfer, the equilibrium states of the model are studied in

the mean field approximation. In the $\mu = \text{const}$ regime, two types of the first order phase transitions (with jumps of the mean values of pseudospins and average electron concentration) are revealed. At $T \rightarrow 0$, phase transitions of the first type disappear, on increasing the transverse field, while those of the second type persist at any large value of the field. The phase transitions of the second type are caused by simultaneous effect of pseudospin-electron interaction and transverse field. It is also shown that in the $n = \text{const}$ regime at zero temperature, the phase separation occurs at all values of a longitudinal field h .

Within a simplified pseudospin model (without electrons and longitudinal field) the spectrum of CuO chains of finite length and intensities of transitions between levels are calculated. A transition occurs (from the ground state) in the low-energy part of the spectrum. The energy of this transition decreases with increasing number of fragments in the chain.

Ground-state phase diagrams of the generalized Blume-Emery-Griffiths model on unfrustrated lattices, as well as on triangular and kagome lattices with the nearest neighbor interaction are constructed.

It is shown that the ground state of a system of classical spins on a anisotropic triangular lattice with interactions within an elementary triangular plaquette can be constructed by minimizing the single plaquette energy density function. Even in the case when all the three angles between pairs of spins on the plaquette are different, there exist five types of global ground-state configurations. The most complicated of these is a spiral four sublattice ordering. On the base of this outcome the experimentally observed spin disorder in NiGa_2S_4 and FeGa_2S_4 compounds is explained.

Some of the results of this study were used in another study where a pseudospin-electron model based on Blume-Emery-Griffiths model is considered and applied to describe the phase transitions and phase separations in intercalated crystals. It is shown that, due to the one-site character of the electron-electron and pseudospin-electron interactions, the partition function of such a model can be presented as the product of the partition functions of independent pseudospin with two shifted parameters and electron subsystems. The phase diagrams of the model as well as the phase separation diagrams and the dependencies of the concentration of intercalated particles on their chemical potential are constructed: exactly for zero temperature and in the mean field approximation for nonzero one. It is shown that in certain interval of chemical potential values the direct interaction between intercalated particles and basic layer electrons leads to the separation into phases with different particle and electron concentrations.

Phase transitions in the Mitsui model without longitudinal field but with a transverse one are investigated in the mean field approximation. The one-to-one correspondence has been established between this model and the two-sublattice Ising-type model with longitudinal and transverse fields. Phase diagrams and diagrams of existence of the ferroelectric phase are constructed. In the case $\Omega = 0$ (Ω is the transverse field), a simple analytical expression for the tricritical temperature

and the condition of existence of the tricritical point are obtained. For $\Omega \neq 0$, systems of equations for the tricritical point and for the condition of its existence are determined.

Keywords: phase transitions, phase separation, intercalation, Ising model, pseudospin-electronic model, ground states.