

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ІНСТИТУТ ФІЗИКИ КОНДЕНСОВАНИХ СИСТЕМ

МАТВЄЄВ Олег Петрович

УДК 544.225.32, 538.935

**ДОСЛІДЖЕННЯ НЕПРУЖНОГО РОЗСІЯННЯ СВІТЛА
В СИЛЬНОСКОРЕЛЬОВАНИХ СИСТЕМАХ
В МЕТОДІ ДИНАМІЧНОГО СЕРЕДНЬОГО ПОЛЯ**

01.04.02 – теоретична фізика

Автореферат
дисертації на здобуття наукового ступеня
кандидата фізико-математичних наук

Львів – 2012

Дисертацією є рукопис.

Робота виконана в Інституті фізики конденсованих систем Національної академії наук України.

Науковий керівник: доктор фізико-математичних наук, старший науковий співробітник **Швайка Андрій Михайлович**, провідний науковий співробітник відділу квантової статистики Інституту фізики конденсованих систем Національної академії наук України (м. Львів)

Офіційні опоненти: доктор фізико-математичних наук, **Шарапов Сергій Геннадійович**, завідувач лабораторії сильнокорельованих низьковимірних систем Інституту теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова Національної академії наук України (м. Київ)

доктор фізико-математичних наук, професор **Костробій Петро Петрович**, завідувач кафедри прикладної математики Національного університету “Львівська політехніка” (м. Львів)

Захист відбудеться “20” червня 2012 р. 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 ознайомитись у науковій бібліотеці Інституту фізики конденсованих систем НАН України за адресою:
79026 м. Львів, вул. Козельницька, 4.

Автореферат дисертації розісланий “18” травня 2012 р.

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

Т.Є. Крохмальський

Актуальність теми. Важливе місце у фізиці сильноскорельованих багаточастинкових систем займає задача дослідження властивостей фази з періодичним розподілом електронної густини. Основний стан такої фази характеризується одночасним порушенням просторової симетрії з утворенням т.з. хвиль зарядової густини (ХЗГ) та появою щілини на одноелектронній густині станів. Серед широкого класу сполук на основі перехідних металів та оксидів рідкісноземельних елементів, які володіють такими властивостями як фазовий перехід метал-діелектрик та перехід у надпровідний стан, можна виділити сполуки, у яких при кімнатних температурах існує стаціонарний перерозподіл зарядової густини з подвійною модуляцією періоду ґратки (впорядкування типу шахової дошки).

На даний час запропоновано декілька фізичних механізмів утворення зарядововпорядкованого стану серед яких можна виділити два основні: коли визначальною є електрон-фононна взаємодія пайерлсівського типу (інтеграл переносу залежить від відстані між вузлами ґратки) [Fröhlich H. *Proc. R. Soc. London A*, 1954, **223**, 296; Peierls R.E. *Quantum Theory of Solids*, 1955] або електрон-діркова взаємодія, що призводить до утворення т.з. екситонного діелектрика з просторовою модуляцією густини заряду (внаслідок наявності непрямої щілини та особливостей енергетичного спектру) [Келдиш Л.В., Копаев Ю.В. *ФТТ*, 1964, **6**, 2791; Wilson J.A. *Solid State Commun.*, 1977, **22**, 551]. У чистому вигляді жоден з цих механізмів не реалізується (результати теоретичних досліджень з чисто електрон-фононним підходом добре погоджуються з експериментальними даними для квазіодновимірних об'єктів, але погано описують тривимірні системи), але недавні дослідження деяких квазідвовимірних сполук з використанням фотоелектронної спектроскопії з кутовим вирізненням [Hellmann S. et al. *Phys. Rev. Lett.*, 2010, **105**, 187401] вказують на переважно електронну природу перерозподілу заряду, що робить актуальним розвиток теоретичних підходів для опису зарядововпорядкованої фази з врахуванням сильних електронних кореляцій. Зокрема, механізм переходу в зарядововпорядковану фазу типу екситонного діелектрика часто реалізується в сильноскорельованих електронних системах, коли в енергетичному спектрі присутня непряма щілина, тобто коли максимум валентної зони і мінімум зони провідності розміщені при різних хвильових векторах.

Одним з підходів у теорії сильноскорельованих електронних систем, який дозволяє отримати точний розв'язок для ряду простих моделей, є метод динамічного середнього поля (ДСП) [Metzner W., Vollhardt D. *Phys. Rev. Lett.*, 1989, **62**, 324; Georges A., Kotliar G., Krauth W., Rozenberg M.J. *Rev. Mod. Phys.*, 1996, **68**, 13]. В теорії ДСП, власноенергетична частина функції Гріна є локальною в границі безмежної вимірності простору, а ґраткова модель проектується на односторонню модель Андерсона і така процедура є точною. В такому підході не потрібно шукати малий параметр для побудови теорії збурень і тому немає обмежень на величину взаємодії, що особливо важливо для опису переходу метал-діелектрик, який відбувається при проміжних значеннях енергії кореляції, коли вона є співмірною з інтегралом переносу. До моделей які мають точний розв'язок у теорії ДСП належить модель Фалікова-Кімбала [Brandt U., Mielsch C. *Z. Phys. B: Condens. Matter*, 1990, **79**, 295]. Це одна з найпростіших моделей яка, однак, описує перехід метал-діелектрик,

перехід у зарядововпорядковану фазу, та фазове розшарування. Властивості моделі Фалікова-Кімбала в однорідній фазі добре відомі [Freericks J.K., Zlatic V. *Phys. Rev. B*, 1998, **58**, 322], тоді як фізичні властивості зарядововпорядкованої фази не були дослідженими.

Присутність зарядового впорядкування у системі експериментально визначають опосередковано з вимірювань зміщень іонних залишків (оскільки зміщення відбуваються одночасно з перерозподілом зарядової густини). Потужним інструментом прямого вимірювання зарядових збуджень у реальних сполуках є електронне непружне (комбінаційне) розсіяння світла, яке дає інформацію про зарядову динаміку в системі. Теоретичний опис процесів комбінаційного розсіяння базується на розрахунку функцій відгуку багаточастинкової системи на зовнішнє збурення (з врахуванням доданків вищих порядків теорії збурень за зовнішнім полем). Формалізм розрахунку багаточасових кореляційних функцій було розроблено в рамках теорії ДСП та отримано результати для однорідної фази моделі Фалікова-Кімбала [Shvaika A.M., Vorobyov O., Freericks J.K., Deveraux T.P. *Phys. Rev. B*, 2005, **71**, 045120], тоді як зарядововпорядкована фаза, де слід очікувати багато резонансних ефектів, залишилася недослідженою.

Додаткову інформацію про зарядову динаміку системи можна отримати з правил сум, які полягають у тому, що існують точні співвідношення між частотними моментами для нерезонансного непружного розсіяння світла чи оптичної провідності та внутрішніми характеристиками системи, такими як середня кінетична чи потенціальна енергії [Freericks J.K., Deveraux T.P., Moraghebi M., Cooper S.L. *Phys. Rev. Lett.*, 2005, **94**, 216401]. З іншого боку правила сум служать для перевірки числових розрахунків.

Підсумовуючи вищесказане, вартує зазначити, що більшість теоретичних досліджень вузькозонних сполук з перехідними та рідкісноземельними елементами проводяться для однорідних невпорядкованих фаз, в той час як фізичні властивості впорядкованих фаз з порушеною симетрією досліджені слабо і фрагментарно. Зокрема, в рамках підходу ДСП, який дозволяє точно враховувати локальні багаточастинкові ефекти, так і не було досліджено вплив впорядкування і відповідної перебудови електронних зон на транспортні властивості та оптичні спектри і спектри непружного розсіяння світла для систем з сильними електронними кореляціями. Також, залишається невивченим вплив модуляції на такі характеристики системи як середня кінетична та потенціальна енергії, інформацію про які можна отримати з відповідних правил сум.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами. Дисертаційна робота виконана в Інституті фізики конденсованих систем НАН України, відповідно до держбюджетних тем НАН України “Розвиток аналітичних методів теорії енергетичного спектру та динаміки сильноскорельованих систем частинок” (2005-2007 рр., номер держреєстрації 0105U002085), “Розвиток і застосування методів аналітичної теорії та комп'ютерного експерименту для опису явищ переносу в іон-електронних системах” (2007-2011 рр., номер держреєстрації 0107U002081) та “Моделювання фізичних властивостей квантових ґраткових систем з багаточастинковими кореляціями” (2008-2012 рр., номер держреєстрації 0108U001154).

Мета і задачі дослідження. *Метою дисертаційної роботи є розрахунок перерізу непружного розсіяння світла та коефіцієнтів переносу в сильноскорельваній зарядововпорядкованій електронній системі в рамках теорії динамічного середнього поля. Для досягнення цієї мети потрібно було роз'язати наступні завдання:*

- Побудова і розв'язок самоузгодженої системи рівнянь теорії ДСП для випадку зарядововпорядкованої фази моделі Фалікова-Кімбала.
- Отримання виразів для оптичної провідності та електро- і теплопровідностей у зарядововпорядкованій фазі.
- Побудова формалізму розрахунку резонансного, нерезонансного та змішаного внесків у переріз комбінаційного розсіяння світла у зарядововпорядкованій фазі моделі Фалікова-Кімбала.
- Дослідження перебудови нерезонансної складової непружного розсіяння х-променів для різних імпульсів передачі.
- Розрахунок правил сум для оптичної провідності і нерезонансного непружного розсіяння х-променів у зарядововпорядкованій фазі моделі Фалікова-Кімбала.

Об'єктом дослідження дисертаційної роботи є сильноскорельована ферміонна система (наприклад, електронна підсистема у сполуках перехідних та рідкісноземельних елементів) з періодичним просторовим розподілом густини заряду, що описується моделлю Фалікова-Кімбала. Предметом дослідження є вплив зарядового впорядкування в системі на спектри комбінаційного розсіяння світла та оптичної провідності, а також на електро- та теплопровідність.

Методи дослідження. Для врахування сильної локальної взаємодії використано непертурбативний підхід теорії динамічного середнього поля. Розв'язок ефективної одновузлової задачі теорії ДСП для вибраної моделі отримується аналітично. Коефіцієнти переносу та переріз комбінаційного розсіяння світла розраховано на основі багаточасових мацубарівських функцій Гріна. За допомогою правила сум було перевірено точність отриманих числових результатів.

Наукова новизна отриманих результатів. У дисертаційній роботі вперше проведено детальний і послідовний аналіз фізичних властивостей фази з подвійною модуляцією густини заряду (впорядкування типу шахової дошки) безспінової моделі Фалікова-Кімбала на безмежновимірній гіперкубічній ґратці.

Вперше для такої системи було отримано точний розв'язок в рамках теорії динамічного середнього поля та було досліджено транспортні властивості системи: побудовано частотні залежності оптичної провідності при різних температурах та отримано температурні залежності електропровідності і електронного внеску у теплопровідність, вивчено температурну поведінку часів релаксації.

Вперше розраховано нерезонансну складову непружного розсіяння х-променів у зарядововпорядкованій фазі; виведено правила сум, з яких виділено внески від потенціальної та кінетичної енергії; отримано, що внески від потенціальної енергії пропорційні квадрату параметра порядку.

Розраховано повний переріз електронного комбінаційного розсіяння світла в

зарядововпорядкованій фазі з врахуванням нерезонансних, резонансних та змішаних внесків. Встановлено умови резонансів (в тому числі й кратних), що пов'язані з особливостями густини станів та багаточастинкової динаміки при зарядовому впорядкуванні, а саме з наявністю внутрішцілинних станів при скінчених температурах.

Практичне значення одержаних результатів. Отримані в роботі результати можна використовувати як базові при подальшому розвитку теорії опису зарядововпорядкованої фази, зокрема, при врахуванні фононної складової. З іншого боку, результати можуть бути корисними для інтерпретації експериментальних даних з комбінаційного розсіяння світла у тривимірних сполуках з зарядововпорядкованою структурою (теорія ДСП є точнішою для вищих вимірностей простору).

Особистий внесок здобувача. У представленій роботі до особистого внеску здобувача належать:

- узагальнення аналітичних виразів для перерізу комбінаційного розсіяння світла, оптичної провідності та транспортних коефіцієнтів у підході теорії ДСП на двопідгратковий випадок [1–4];
- проведення числових розрахунків згаданих вище величин та числова перевірка правил сум для оптичної провідності та нерезонансного непружного розсіяння x-променів [1–4];
- участь в обговоренні та інтерпретації отриманих результатів.

Апробація результатів дисертації. Основні результати роботи доповідалися і обговорювалися на: VII Всеукраїнська школа-семінар та конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини (Львів, Україна, 2007); NATO ARW Workshop “Properties and Applications of Thermoelectric Materials” (Hvar, Croatia, 2008); IV International Conference “Physics of Disordered Systems” (Lviv, Ukraine, 2008); XII International Conference “Physics and Technology of Thin Films and Nanosystems” (Ivano-Frankivsk, Ukraine, 2009); 3-rd Conference Statistical Physics “Modern Trends and Applications” (Lviv, Ukraine, 2009); X Всеукраїнська школа-семінар та конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини (Львів, Україна, 2010); QFS2010: International Symposium on Quantum Fluids and Solids (Grenoble, France, 2010); II Міжнародна школа-конференція “Актуальні проблеми фізики напівпровідників” (Дрогобич, Україна, 2010); Young scientists conference “Modern problems of Theoretical Physics” (Kyiv, Ukraine, 2010); NATO ARW Workshop “New Materials for Thermoelectric Applications: Theory and Experiment” (Hvar, Croatia, 2011); Різдвяні дискусії (Львів, Україна, 2008), а також на семінарах в Інституті фізики конденсованих систем НАН України.

Публікації. За матеріалами дисертації опубліковано 4 статті у фахових наукових виданнях [1–4] та 10 тез конференцій [5–14].

Структура та об'єм дисертації. Дисертаційна робота викладена на 115-ти сторінках (з списком використаних джерел — 138) і складається з вступу, чотирьох розділів основної частини, загальних висновків та списку використаних джерел зі 182-ма найменуваннями.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У **вступі** обґрунтовано актуальність теми, сформульовано мету та завдання, відзначено наукову новизну і практичне значення отриманих результатів, визначено особистий внесок здобувача та наведено інформацію про апробацію результатів роботи.

Перший розділ присвячено огляду літератури з досліджень зарядововпорядкованих систем. Висвітлено теоретичні механізми утворення зарядового впорядкування, описано непертурбативний метод теорії ДСП та результати для моделі Фалікова-Кімбала (Ф-К). Здійснено огляд експериментальних і теоретичних робіт присвячених комбінаційному розсіянню світла в сильноскорельованих електронних системах.

У **другому** розділі досліджено оптичні та транспортні властивості моделі Фалікова-Кімбала в фазі з подвійною модуляцією густини заряду з використанням підходу теорії ДСП. Опис зарядововпорядкованої фази здійснено на мові двопідґраткової системи з гамільтоніаном моделі Ф-К:

$$\mathcal{H} = \sum_{ia} \mathcal{H}_i^a - \sum_{ijab} t_{ij}^{ab} d_{ia}^\dagger d_{jb}, \quad \mathcal{H}_i^a = U n_{id}^a n_{if}^a - \mu_d^a n_{id}^a - \mu_f^a n_{if}^a, \quad (1)$$

де індекс i пробігає вузли підґраток, а індекс $a=A$ чи B позначає підґратку. Розглядався випадок половинного заповнення з фіксованою концентрацією f -частинок та з переносом тільки між найближчими сусідами, що забезпечується виконанням умови $t_{ij}^{AA} = t_{ij}^{BB} = 0$. У підході теорії ДСП [Brandt U., Mielsch C. *Z.Phys. B: Condens. Matter*, 1990, **79**, 295] власноенергетична частина функції Гріна у границі безмежної вимірності простору ($D \rightarrow \infty$) стає локальною, тому для ґраткової функції Гріна виходячи з (1) отримано рівняння Дайсона в матричному вигляді (на мові підґраток):

$$\Sigma_{ij}^{ab}(\omega) = \Sigma_i^a(\omega) \delta_{ij} \delta_{ab}, \quad G_{\mathbf{k}}(\omega) = [z(\omega) - t_{\mathbf{k}}]^{-1}, \quad (2)$$

де z та інтеграл переносу $t_{\mathbf{k}}$ є матрицями 2×2 :

$$z(\omega) = \begin{pmatrix} \omega + \mu_d^A - \Sigma^A(\omega) & 0 \\ 0 & \omega + \mu_d^B - \Sigma^B(\omega) \end{pmatrix}, \quad t_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} 0 & \epsilon_{\mathbf{k}} \\ \epsilon_{\mathbf{k}} & 0 \end{pmatrix} \quad (3)$$

та $\epsilon_{\mathbf{k}} = -\lim_{D \rightarrow \infty} \frac{t^*}{\sqrt{D}} \sum_{\alpha=1}^D \cos k_{\alpha}$ — зонна енергія в наближенні найближчих сусідів на гіперкубічній ґратці. Ґраткова задача проектувалася на локальну з введенням залежного від часу поля так, що однодомішкова функція Гріна у цьому полі стає рівною локальній ґратковій функції Гріна. У даному випадку існують дві локальні функції Гріна – на підґратці A та на підґратці B , тому було введено два

часовозалежні динамічні середні поля $[\lambda^a(\omega)]$ і розв'язано дві однодомішкові задачі. Вираз для однодомішкової функції Гріна для моделі Фалікова-Кімбала відомий, що дозволило отримати систему рівнянь для локальної граткової функції Гріна, власноенергетичної частини та динамічного середнього поля:

$$G^{aa}(\omega) = \frac{1}{\omega + \mu_d^a - \Sigma^a(\omega) - \lambda^a(\omega)}, \quad \Sigma^a(\omega) = \omega + \mu_d^a - \lambda^a(\omega) - G_{\text{imp}}^a(\omega)^{-1},$$

$$G_{\text{imp}}^a(\omega) = \frac{(1 - n_f^a)}{\omega + \mu_d^a - \lambda^a(\omega)} + \frac{n_f^a}{\omega + \mu_d^a - U - \lambda^a(\omega)}, \quad (4)$$

яка розв'язувалася числовим способом для обох підграток $a = A$ та B .

Алгоритм знаходження розв'язку теорії ДСП з фіксованим параметром порядку полягав у такому виборі концентрацій n_f^A та n_f^B , щоб сума $n_f^A + n_f^B$ була фіксованою і дорівнювала повній концентрації f -частинок. Параметр порядку дорівнює різниці концентрацій на підгратках $\Delta n_f = (n_f^A - n_f^B)/2$ і визначався з умови термодинамічної рівноваги $\Delta \mu_f = 0$. З розрахованих функцій Гріна було досліджено температурну поведінку одночастинкової густини станів (ГС) $[A(\omega) = -\text{Im}G(\omega)/\pi]$ у зарядововпорядкованій фазі, що приведена на рис. 1.

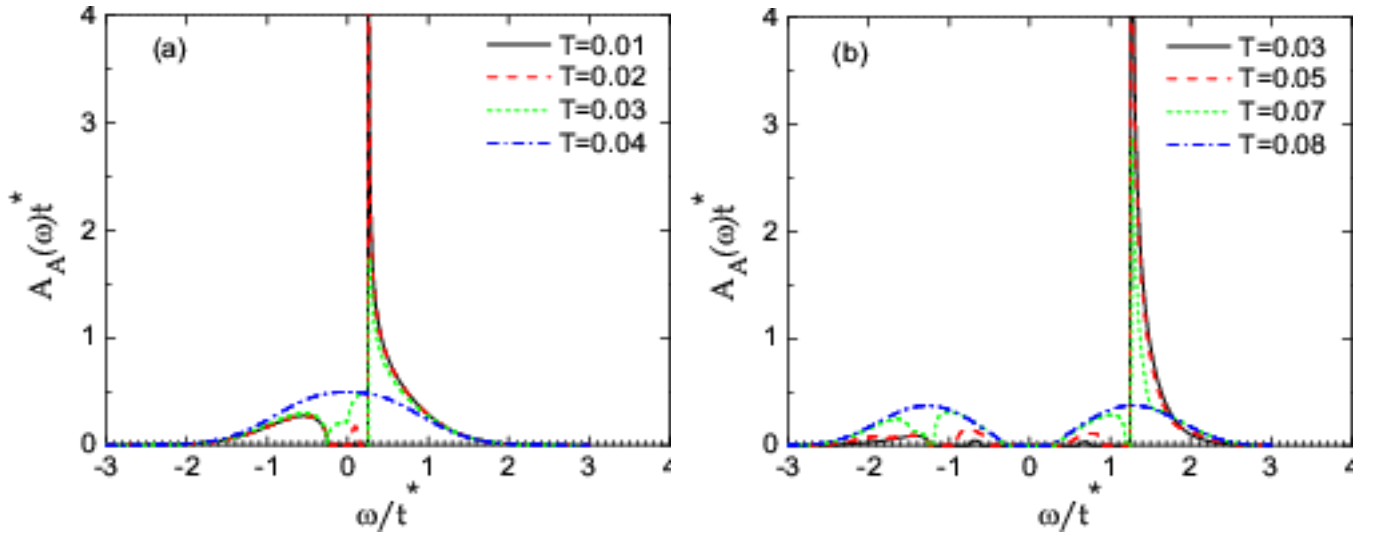


Рис. 1: Густина станів на підгратці А для різних температур T у зарядововпорядкованій фазі на гіперкубічній гратці при (а) $U=0.5$ і (б) $U=2.5$. Ширина зарядової щілини при $T=0$ дорівнює $U=0.5$, а відстань між максимумами внутрішніх станів дорівнює енергії E ($E \approx 0.18$ для $U=0.5$, $E \approx 1.7$ для $U=2.5$). Густина станів для підгратки B є дзеркальним відображенням відносно $\omega=0$.

Отримано, що при нулі температури, коли система ідеально впорядкована (одна підгратка повністю заповнена, інша — пуста), на ГС присутня щілина шириною U . При підвищенні температури ідеальне впорядкування руйнується і щілина швидко заповнюється внутрішніми станами в околі певних енергій $\pm E/2$, а при досягненні критичної температури повністю зникає. Подальша робота полягала у

дослідженні як такі особливості ГС проявляються на спектрах оптичної провідності.

За означенням, оптична провідність пропорційна функції відгуку, побудованій на операторах струму j [Kubo R. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 1957, **12**, 570; Greenwood D.A. *Proc. Phys. Soc.*, 1958, **71**, 585]:

$$\sigma(\omega) = \frac{1}{\omega} \text{Im} \Pi_{jj}(\omega), \quad j_\alpha = \sum_{abk} \frac{\partial \epsilon_k^{ab}}{\partial k_\alpha} d_a^\dagger(\mathbf{k}) d_b(\mathbf{k}). \quad (5)$$

Така функція відгуку відповідає кореляційній функції, побудованій на чотирьох операторах народження і знищення, розрахунок якої проводився стандартним чином і в теорії ДСП вона визначається тільки внеском від голої петлі [Khurana A. *Phys. Rev. Lett.*, 1990, **64**, 1990]. У зарядовоупорядкованій фазі, оскільки оператор струму пов'язує різні підгратки, оптична провідність є сумою голих петель з відповідними комбінаціями індексів підграток:

$$\begin{aligned} \Pi_{jj}(iv_l) &= T \sum_m \Pi_{m,m+l} \\ &= T \sum_m \frac{1}{N} \sum_k j_k^2 (G_{km}^{AA} G_{km+l}^{BB} + G_{km}^{AB} G_{km+l}^{AB} + G_{km}^{BA} G_{km+l}^{BA} + G_{km}^{BB} G_{km+l}^{AA}), \end{aligned} \quad (6)$$

де сума за хвильовим вектором була порахована аналітично.

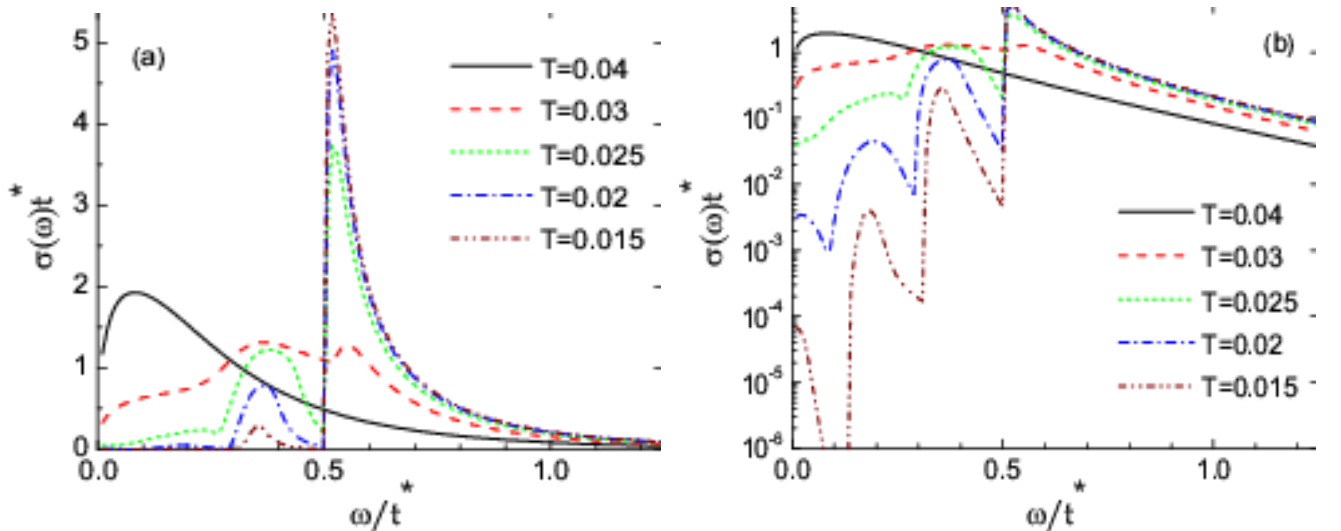


Рис. 2: Оптична провідність для взаємодії $U = 0.5$ при різних температурах; (a) — лінійна шкала, (b) — логарифмічна шкала.

Частотну залежність оптичної провідності для випадку металічної фази з $U = 0.5$ при різних температурах зображено на рис. 2. При високих температурах спостерігається звична для металу поведінка, тобто є один низькоенергетичний пік (піку Друде немає, бо це не є фермі-рідина), який поширюється в сторону високих енергій відповідно до ширини валентної зони у металах. При температурі нижчій за критичну температуру переходу в зарядовоупорядковану фазу, відбувається

зміщення спектральної густини в бік вищих частот, оскільки система при малих T стає діелектриком. Різкий пік з'являється на частоті $\omega=U$, що відповідає міжзонним переходам з нижньої $\tilde{\omega}<-U/2$ у верхню $\tilde{\omega}>U/2$ зону. Також з'являються три додаткові піки на нижчих частотах $\omega=(U+E)/2$, E , $(U-E)/2$, що пов'язані з переходами на внутрішцілінні стани; ці піки зникають при $T \rightarrow 0$, оскільки внутрішцілінні стани неперервно “виморожуються” і зникають при $T=0$. При великих значеннях U температурна поведінка оптичної провідності є подібною.

Додаткову інформацію про зарядову динаміку системи було отримано з правила сум, яке полягає у тому, що інтеграл від оптичної провідності дорівнює середній кінетичній енергії (СКЕ) і у зарядовопорядкованій фазі має наступний вигляд:

$$\int_0^{\infty} d\omega \sigma(\omega) = -\pi K = -\pi T \sum_m \frac{1}{2N} \sum_k \epsilon_k [G_{mk}^{AB} + G_{mk}^{BA}]. \quad (7)$$

На рис. 3 зображено залежності СКЕ від взаємодії U при $T=0$ (ліворуч) та від температури (праворуч). Отримано, що при нулі температури для малих U ($U<0.648$) СКЕ у зарядовопорядкованій фазі менша за модулем аніж в однорідній. Це зумовлено тим, що в однорідній фазі ймовірність перескоків вища, оскільки існують сусідні вузли, які не заселені локалізованими електронами, тоді як у зарядовопорядкованій фазі кожен перескок потребує затрати енергії величиною U , оскільки кожна з підгруп є однорідно заселеною (при $T=0$). Для великих значень U

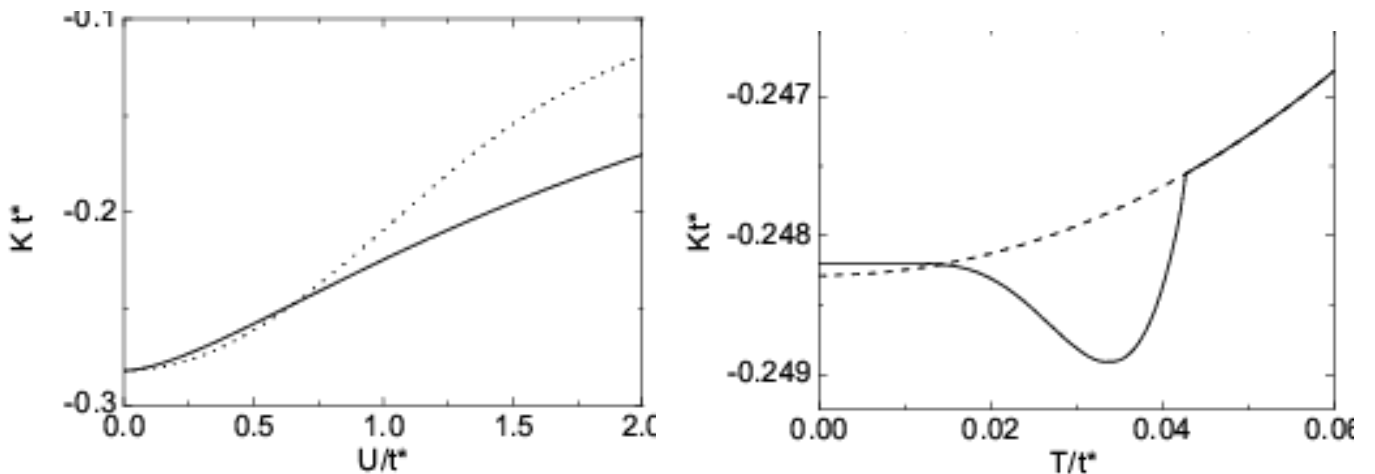


Рис. 3: Залежність середньої кінетичної енергії K від взаємодії U при $T=0$ (ліворуч) та від температури при $U=0.645$ (праворуч). Суцільна лінія відповідає випадку зарядовопорядкованої фази, а штрихова — однорідному розв'язку.

спостерігається аномальна поведінка, коли СКЕ впорядкованої фази стає більшою за модулем аніж в однорідній.

З температурної залежності отримано, що при малих U СКЕ у зарядовопорядкованій фазі є меншою за модулем ніж в однорідній. Однак, при $U > 0.52$ з'являється температурна область в околі T_c на якій СКЕ у зарядовопорядкованій фазі є більшою за модулем ніж в однорідній. Знайдене “критичне” значення U відповідає появі прогину на однорідній ГС на рівні хімічного потенціалу. При збільшенні U ця область температур розширюється і при $U > 0.648$ СКЕ у зарядовопорядкованій

фазі стає більшою за модулем ніж в однорідній на усьому інтервалі від T_c до $T=0$. З отриманого аналітично виразу для оптичної провідності було виведено формулу для коефіцієнта електропровідності:

$$\sigma_{dc} = \lim_{\omega \rightarrow 0} \sigma(\omega), \quad \sigma_{dc} = 2 \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \left[-\frac{df(\omega)}{d\omega} \right] \tau(\omega), \quad (8)$$

і для багаточастинкового часу релаксації $\tau(\omega)$ одержано точний вираз. На його основі було також пораховано електронний внесок у теплопровідність κ_e , що виражається через т.з. транспортні коефіцієнти L_{ij} , які відтворюють невзаємодіючу форму Мотта-Телунга [Jonson M., Mahan G.D., *Phys. Rev. B*, 1990, **42**, 9350]:

$$\kappa_e = \frac{1}{T} \left[L_{22} - \frac{L_{12}L_{21}}{L_{11}} \right], \quad L_{ij} = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \left[-\frac{df(\omega)}{d\omega} \right] \tau(\omega) \omega^{i+j-2}. \quad (9)$$

Інші транспортні коефіцієнти, що відповідають за термоелектричні ефекти, при половинному заповненні, внаслідок електрон-діркової симетрії, дорівнюють нулеві.

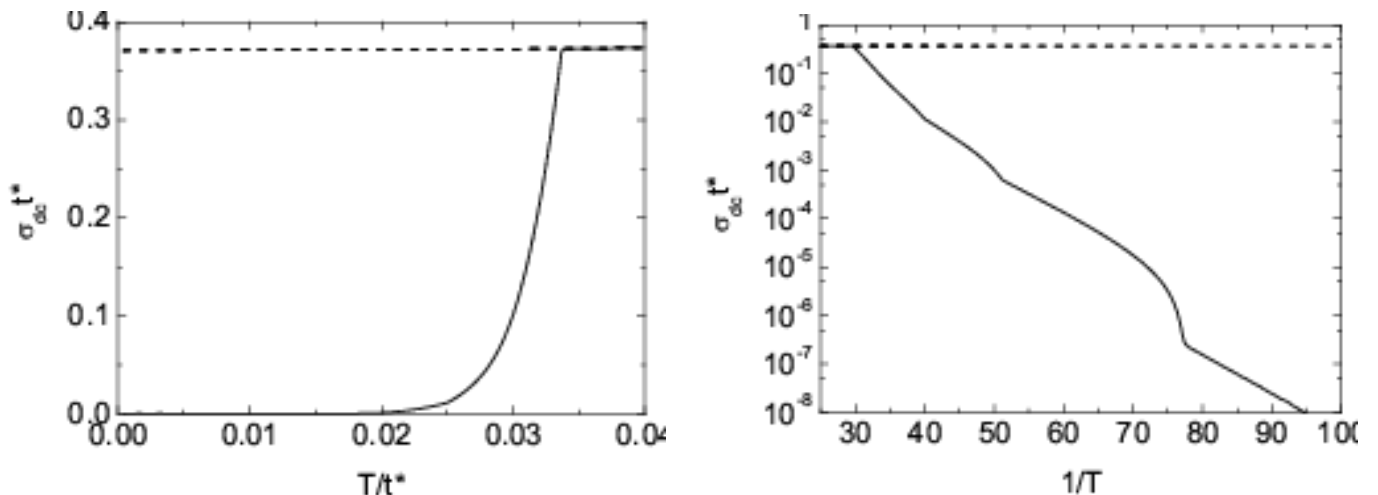


Рис. 4: Залежність електропровідності від температури при $U = 0.5$ ($T_c \approx 0.034$). Суцільна лінія відповідає випадку зарядововпорядкованої фази, а штрихова — однорідному розв'язку. Ліворуч — лінійна шкала, праворуч — логарифмічна з залежністю від оберненої температури.

Температурні залежності електропровідності для малих U наведені на рис. 4. Отримано, що при температурах нижче за критичну електропровідність сильно знижується. При низьких температурах, внаслідок множника $-df(\omega)/d\omega$, основні внески у електропровідність походять з вузької області шириною $4T$ біля рівня хімічного потенціалу (так зване вікно Фермі). Внаслідок наявності внутрішліїнних станів в межах вікна Фермі, електропровідність не має строго експоненційної температурної залежності активаційного типу (про що свідчить наявність нелінійних ділянок на суцільній кривій на рис. 4), однак це відхилення незначне і воно зникає при температурах близьких до нуля. При великих U внутрішліїнні стани є поза межами вікна Фермі і зарядове впорядкування призводить до експоненційного спадання електропровідності при пониженні температури.

У третьому розділі досліджено нерезонансну складову непружного розсіяння світла та х-променів у зарядововпорядкованій фазі моделі Фалікова-Кімбала. Розсіяння фотонів зонними електронами описується формулою для поперечного перерізу непружного розсіяння електромагнітних хвиль, отриману Шастрі і Шрайманом [Shastry, B.S. and Shraiman, B.I., *Phys. Rev. B*, 1990, **65**, 1068]:

$$R(\mathbf{q}, \Omega) = 2\pi \sum_{i,f} \frac{e^{-\beta\varepsilon_i}}{\mathcal{Z}} \delta(\varepsilon_f - \varepsilon_i - \Omega) \left| g(\mathbf{k}_i) g(\mathbf{k}_f) e_\alpha^i e_\beta^f \langle f | M^{\alpha\beta}(\mathbf{q}) | i \rangle \right|^2, \quad (10)$$

де $\Omega = \omega_i - \omega_f$ та $\mathbf{q} = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f$ – енергія та імпульс передачі, відповідно, $\mathbf{e}^{i(f)}$ – вектор поляризації падаючого (розсіяного) фотона і $\varepsilon_{i(f)}$ позначає власні енергії електронів; $g(\mathbf{q}) = (hc/V\omega_q)^{1/2}$ – т.з. “сила розсіяння” з $\omega_q = c|\mathbf{q}|$. Оператор розсіяння $M^{\alpha\beta}(\mathbf{q})$ містить як нерезонансну так і резонансну складові:

$$\begin{aligned} \langle f | M^{\alpha\beta}(\mathbf{q}) | i \rangle &= \langle f | \gamma_{\alpha,\beta}(\mathbf{q}) | i \rangle \\ &+ \sum_l \left(\frac{\langle f | j_\beta(\mathbf{k}_f) | l \rangle \langle l | j_\alpha(-\mathbf{k}_i) | i \rangle}{\varepsilon_l - \varepsilon_i - \omega_i} + \frac{\langle f | j_\alpha(-\mathbf{k}_i) | l \rangle \langle l | j_\beta(\mathbf{k}_f) | i \rangle}{\varepsilon_l - \varepsilon_i + \omega_f} \right), \end{aligned} \quad (11)$$

де оператор струму і тензор напружень на двосортній гратці дорівнюють

$$\begin{aligned} j_\alpha(\mathbf{q}) &= \sum_{abk} \frac{\partial t_{ab}(\mathbf{k})}{\partial k_\alpha} d_a^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2) d_b(\mathbf{k} - \mathbf{q}/2), \\ \gamma_{\alpha,\beta}(\mathbf{q}) &= \sum_{abk} \frac{\partial^2 t_{ab}(\mathbf{k})}{\partial k_\alpha \partial k_\beta} d_a^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2) d_b(\mathbf{k} - \mathbf{q}/2). \end{aligned} \quad (12)$$

Після підстановки оператора розсіяння у формулу для поперечного перерізу отримано три доданки: чисто резонансний доданок, нерезонансний доданок та змішаний (оскільки оператор розсіяння входить у формулу перерізу в квадраті).

Переріз розсіяння виражається через т.з. функцію відгуку. Нерезонансна функція відгуку отримується з кореляційної функції, побудованої на двох операторах тензора напружень:

$$\chi_{\tilde{\gamma}\tilde{\gamma}}(\tau_1, \tau_2) = \langle T_\tau \tilde{\gamma}(\tau_1) \tilde{\gamma}(\tau_2) \rangle. \quad (13)$$

Фур’є перетворення такої кореляційної функції представлено у вигляді “узагальнених поляризованостей”, просумованих за мацубарівськими частотами. Для випадку зарядововпорядкованої фази, діаграми Фейнмана для узагальнених поляризованостей $\Pi_{m,m+l}$ представлені на рис. 5, де введено додаткові індекси підграток від a до l . Повна звідна зарядова вершина (заштрихований прямокутник на

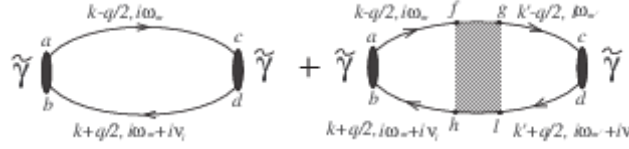


Рис. 5: Фейнманівські діаграми для узагальнених поляризованостей. Внаслідок властивостей незвідної зарядової вершини моделі Фалікова-Кімбала, отримується $m = m'$.

рис. 5) моделі Фалікова-Кімбала є діагональною функцією частот і отримується з рівняння Бете-Салпітера через незвідну зарядову вершину Γ_a яка для цієї моделі у підході теорії ДСП є локальною і має такий самий функціональний вигляд як і для однорідної фази [Shvaika A. M., *J. Phys. Stud.*, 2001, **5**, 349]:

$$\Gamma_a(i\omega_m, i\omega_{m'}; i\nu_l) = \delta_{mm'} \Gamma_{m, m+l}^a, \quad \Gamma_{m, m+l}^a = \frac{1}{T} \frac{\Sigma_m^a - \Sigma_{m+l}^a}{G_m^{aa} - G_{m+l}^{aa}}. \quad (14)$$

При експериментальних дослідженнях найчастіше розглядаються три типи симетрії: A_{1g} , B_{1g} та B_{2g} . Для симетрії B_{2g} нерезонансна складова комбінаційного розсіяння світла дорівнює нулеві. У випадку симетрії B_{1g} , функція відгуку визначається тільки першим доданком (гола петля) фейнманівських діаграм на рис. 5. У випадку симетрії A_{1g} нерезонансна функція відгуку містить внески від доданків фейнманівських діаграм на рис. 5. Повна узагальнена поляризованість є сумою двох внесків від голої та перенормованої петель, відповідно:

$$\Pi_{m, m+l} = \Pi_{m, m+l}^{(1)} + \Pi_{m, m+l}^{(2)}, \quad (15)$$

для яких було отримано аналітичні вирази. Здійснивши аналітичне продовження у виразі для узагальненої поляризованості, отримано остаточний вираз для функції відгуку нерезонансного комбінаційного розсіяння.

У випадку непружного розсіяння х-променів, падаючий фотон обмінюється з електронною системою як енергією так і імпульсом. В теорії ДСП залежність від імпульсу передачі входить через величини $X = \frac{1}{D} \sum_{p=1}^D \cos q_p$ та $X' = \frac{1}{D} \sum_{p=1}^D \alpha_p \cos^2 \frac{q_p}{2}$ ($\alpha_p = 1$ відповідає симетрії A_{1g} і $\alpha_p = (-1)^p$ відповідає симетрії B_{1g}).

Для нерезонансного непружного розсіяння х-променів досліджено поведінку функцій відгуку для різних значень імпульсу передачі q у першій зоні Брилюена (ЗБ). На рис. 6 представлено результати для симетрій B_{1g} та A_{1g} у випадку металічної фази з $U = 0.5$ при різних температурах та імпульсах передачі. У центрі зони Брилюена ($X=1$) функція відгуку відповідає комбінаційному розсіянню з різкими особливостями для симетрії B_{1g} і з сильним загладжуванням для симетрії A_{1g} . При відході від центра зони, відбувається різка заміна кореневої сингулярності при частоті $\Omega = U$ для симетрії B_{1g} на сходинкоподібну з великим наростанням інтенсив-

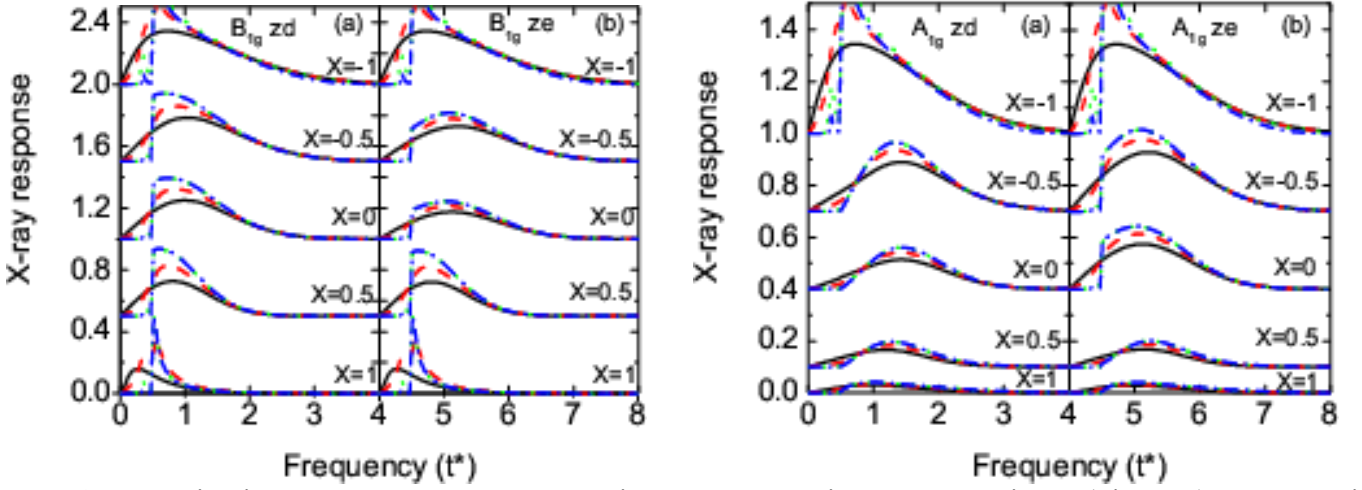


Рис. 6: Функція відгуку нерезонансного розсіяння х-променів для симетрії B_{1g} (ліворуч) та симетрії A_{1g} (праворуч) при $U = 0.5$ вздовж діагоналі та по краю першої зони Брилюена. Набір кривих відповідає температурам $T = 0.04, 0.03, 0.02, 0.015$. zd відповідає діагональному напрямку, а ze — напрямку вздовж краю першої зони Брилюена.

ності у куті ЗБ з $X = -1$, коли імпульс передачі співпадає з хвильовим вектором впорядкування. У випадку симетрії A_{1g} , при русі вздовж діагоналі ЗБ відбувається поступове наростання інтенсивності без різких особливостей, а при русі вздовж краю зони розвивається сходинка з сильним наростанням інтенсивності у куті зони, що також пов'язане зі співпадінням імпульсу передачі з хвильовим вектором впорядкування.

Симетрія A_{1g} відображає повну симетрію ґратки, що призводить до усереднення відгуку і згладжування різкої сингулярності. Для симетрії B_{1g} сингулярний пік при енергії, що дорівнює ширині зарядової щілини, зберігається. Таким чином, поряд з вершинними поправками, які відповідають за екранування системою довгохвильових зарядових флуктуацій, ефект усереднення відгуку по всіх напрямках також призводить до екранування збуджень, пов'язаних з перерозподілом заряду.

Для додаткового аналізу динаміки системи було пороховане правило сум для нерезонансного непружного розсіяння х-променів, яке полягає у збереженні наступної тотожності:

$$I = \int_0^{+\infty} d\Omega \Omega \chi_N(\Omega) = \frac{\pi}{2} \langle [\tilde{\gamma}^\dagger(\mathbf{q}) [H, \tilde{\gamma}(\mathbf{q})]] \rangle, \quad I = I_K + I_{\Pi}. \quad (16)$$

Було отримано, що правило сум для першого моменту функції відгуку нерезонансного непружного розсіяння х-променів містить два внески: від кінетичної та потенціальної енергій. Внесок від потенціальної енергії є пропорційним квадрату параметра порядку $(\Delta n_f)^2$. Отримано, що при малих значеннях взаємодії основний внесок у правило сум походить від кінетичної енергії, а при великих — від потенціальної енергії. Залежність правила сум від імпульсу для симетрії B_{1g} є слабкою для внеску від потенціальної енергії і сильною для кінетичної енергії (рис. 7). Для симетрії A_{1g} обидва внески сильно залежать від імпульсу. Для обох

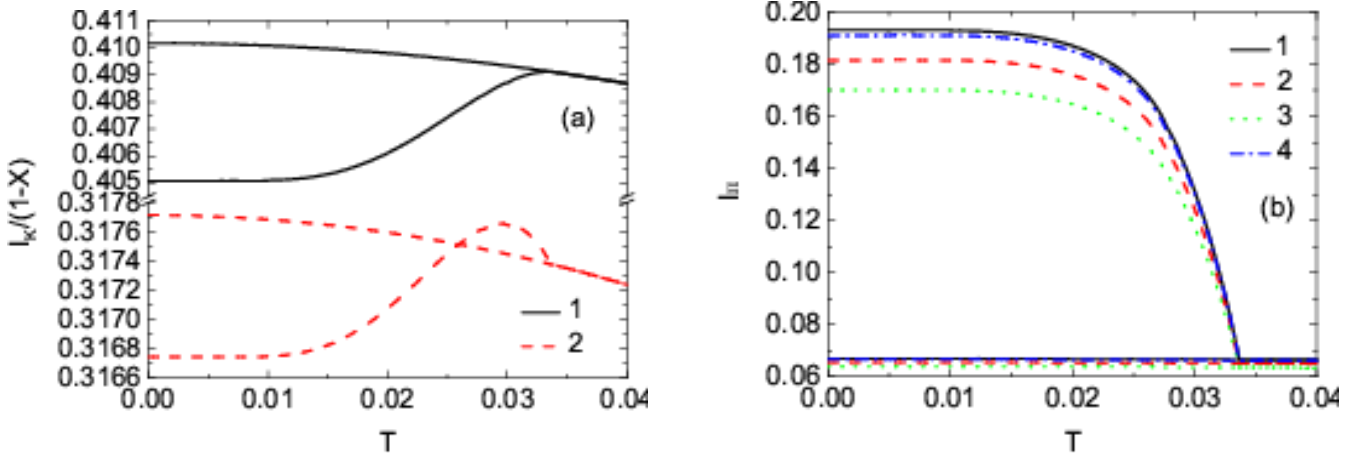


Рис. 7: B_{1g} правило сум як функція температури при $U=0.5$. (а) Внесок від кінетичної енергії $I_K/(1-X)$: 1 – діагональ зони у Σ -напрямку ($-1 \leq X \leq 1$, $X'=0$); 2 – X -точка на краю зони ($X=0$). (б) Внесок від потенціальної енергії I_{II} : 1 – діагональ зони по Σ -напрямку ($-1 \leq X \leq 1$, $X'=0$); 2 – край зони $X=-0.5$; 3 – край зони $X=0$ (X -точка); 4 – край зони $X=0.5$. Тонкі лінії відповідають розв'язку для однорідного випадку, штучно продовженому до температур нижче критичної T_c .

симетрій найбільше значення першого моменту (загальне і для кожного внеску зокрема) спостерігається у куті ЗБ ($X=-1$) як в однорідній так і у впорядкованій фазах. Зростання величини першого моменту нижче T_c є лінійним щодо різниці $T_c - T$ і пропорційним до квадрату параметра порядку зарядового порядкування $(\Delta n_j)^2$; це означає, що якщо експериментальна система має чіткий поділ на нижню і верхню енергетичні зони, то вимірювання спектральної густини дає інформацію про параметр порядку як функцію температури. Виведені співвідношення для першого моменту правила сум були також використані для перевірки числових розрахунків.

Четвертий розділ присвячено розрахунку повної функції відгуку комбінаційного розсіяння світла, а саме розрахунку резонансної та змішаної складових. Подібно як і для нерезонансного випадку, змішана і резонансна складові функції відгуку конструюються з відповідних багаточасових кореляційних функцій [Shvaika A.M., Vorobyov O., Freericks J.K., Deveraux T.P., *Phys. Rev. B*, 2005, **71**, 045120]. Функція відгуку для змішаного внеску отримується з кореляційної функції, побудованої на одному операторі тензора напружень і двох операторах струму:

$$\chi_{\tilde{\gamma},f,i}(\tau_1, \tau_2, \tau_3) = \left\langle T_{\tau} \tilde{\gamma}(\tau_1) j^{(f)}(\tau_2) j^{(i)}(\tau_3) \right\rangle. \quad (17)$$

Фейнманівські діаграми для узагальнених внесків у змішану функцію відгуку зображені на рис. 8, і відмінні від нуля тільки для симетрії A_{1g} .

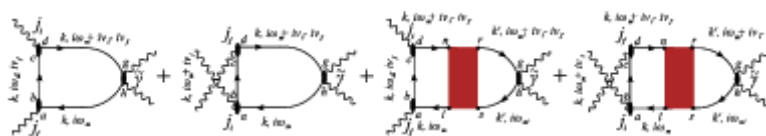


Рис. 8: Фейнманівські діаграми для узагальнених поляризованостей змішаної функції відгуку. Внаслідок того, що незвідна зарядова вершина для моделі Фалікова-Кімбала є діагональною,

виконується рівність $i\omega_m = i\omega_m$.

Резонансна функція відгуку конструюється з чотиричасової кореляційної функції, яка побудована на чотирьох операторах струму:

$$\chi_{i,f,f,i}(\tau_1, \tau_2, \tau_3, \tau_4) = \left\langle T_\tau j^{(i)}(\tau_1) j^{(f)}(\tau_2) j^{(f)}(\tau_3) j^{(i)}(\tau_4) \right\rangle, \quad (18)$$

а відповідні фейнманівські діаграми для узагальнених внесків у резонансну функцію відгуку зображені на рис. 9, де введено додаткові індекси підґраток від a до s . Для симетрій B_{1g} та B_{2g} , узагальнена поляризація $\Pi_{m,m-f,m+i-f,m-f}^{R,I}$ складається з суми двох перших діаграм першого рядка на рис. 9 (гола петля та доданок з вертикальним перенормуванням), а узагальнена поляризація $\Pi_{m,m+i,m+i-f,m-f}^{R,II}$ містить лише перший доданок з третього і четвертого рядків (голі петлі), тоді як для симетрії A_{1g} узагальнена поляризація містить внески від усіх діаграм (голу петлю, доданки з вертикальним і горизонтальним перенормуванням).

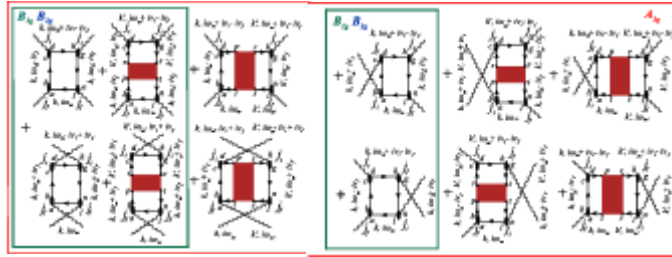


Рис. 9: Фейнманівські діаграми для узагальнених поляризованостей резонансної функції відгуку.

На рис. 10 наведено спектри повного комбінаційного відгуку при $T=0.02$ для симетрії B_{1g} для $U=0.5$ з різними енергіями фотонів падаючого світла. Структура та походження основних піків на спектрах повного відгуку КР світла зберігаються такими ж як і для нерезонансного випадку. Тобто, при температурах нижчих за критичну, відображаються одночастинкові переходи між чотирма зонами. При наближенні температури до нуля, залишається лише один великий пік при енергії U , що відповідає переходам між верхньою та нижньою зонами, оскільки внутрішні стани зникають.

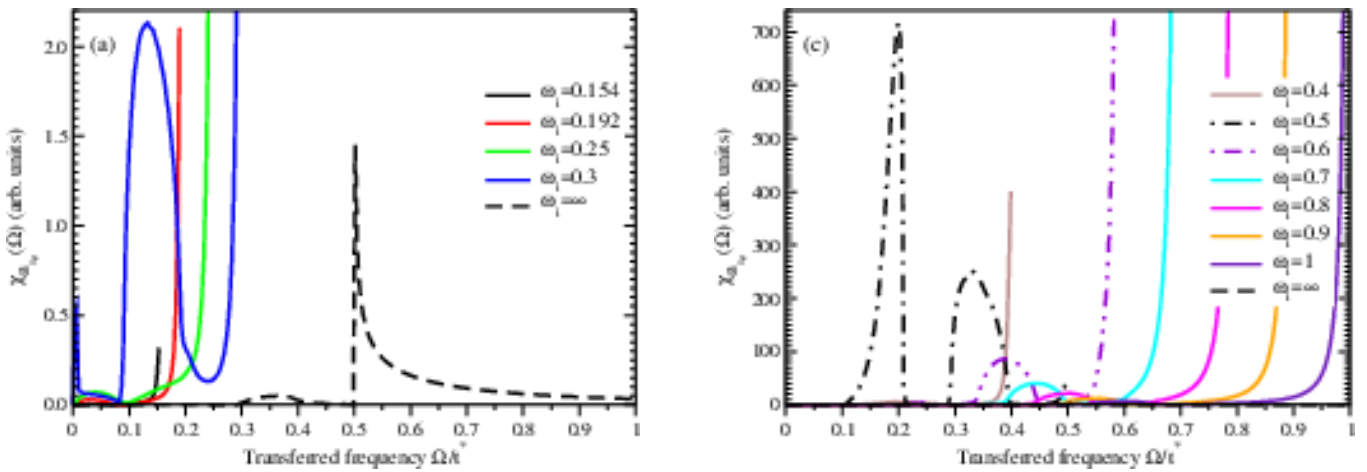


Рис. 10: Повний спектр комбінаційного розсіяння для симетрії B_{1g} при різних частотах падаючого світла і на різних масштабах інтенсивності на сусідніх графіках при $T=0.02$ і $U=0.5$. Різні типи ліній позначають різні частоти падаючого світла. Нерезонансний відгук (коли $\omega_i=\infty$) також наведений і позначений штриховою лінією.

З аналізу кінцевого виразу для повної функції відгуку КР світла отримано, що окрім резонансних піків при енергіях $\Omega = U$, $(U+E)/2$, E , та $(U-E)/2$, (див. рис. 1 для ГС) можуть існувати піки, що відповідають двочастинковим збудженням при $\Omega=(3E-U)/2$, $(U+E)/2$, E , $U-E$ та $(U-E)/2$, причому деякі з них співпадають з енергіями одночастинкових переходів. Також, велике резонансне наростання відбувається коли ω_i або ω_f наближаються до цих енергій.

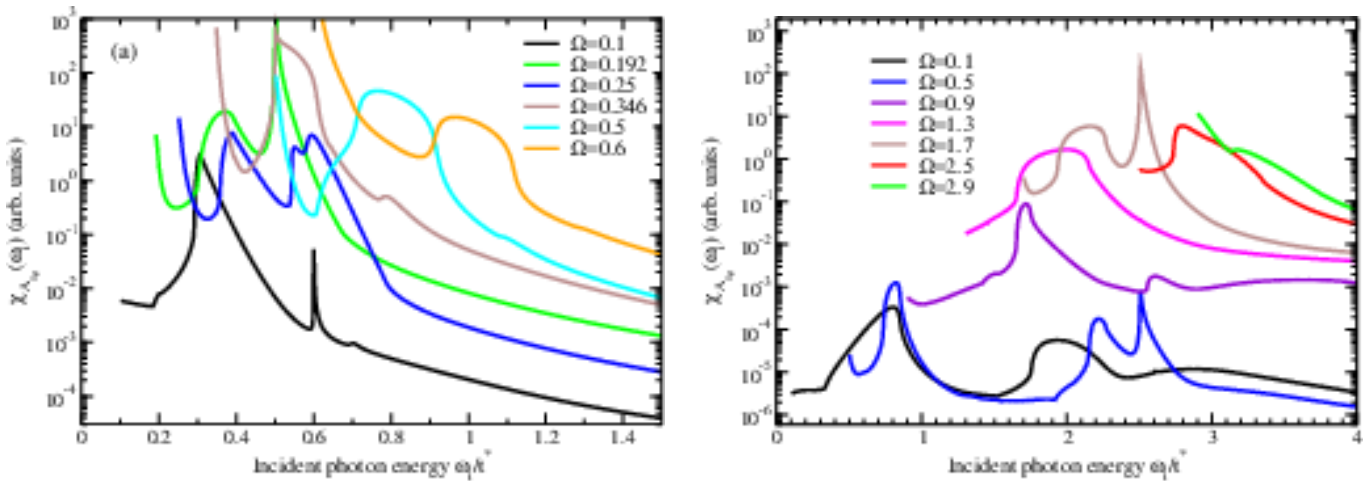


Рис. 11: Резонансні профілі у логарифмічному масштабі для різних частот передачі фонона при $T=0.02$ для $U=0.5$ (ліворуч) та при $T=0.06$ для $U=2.5$ (праворуч). Різні типи ліній позначають різні частоти передачі Ω (які також можна відрахувувати від нефізичного випадку, коли є розбіжність при $\omega_i \rightarrow \Omega$).

На рис. 11 приведені профілі резонансного КР світла (коли фіксується частота передачі Ω і досліджується залежність від частоти налітаючого фотона ω_i) для різних частот передачі Ω . Отримані резонансні піки відповідають випадкам коли енергія налітаючого або розсіяного фотонів дорівнює енергії одно- та

багаточастинкових збуджень у зарядововпорядкованій фазі.

ОСНОВНІ РЕЗУЛЬТАТИ ТА ВИСНОВКИ

1. Розвинуто метод отримання та проведено розрахунок коефіцієнтів переносу в сильноскорельованій зарядововпорядкованій системі в теорії динамічного середнього поля. Показано, що зарядове впорядкування понижує електро- та теплопровідності, а наявність внутрішцілинних станів при низьких температурах зумовлює відхилення їхньої температурної залежності від простої експоненційної залежності активаційного типу.
2. Встановлено, що при переході у зарядововпорядкований стан, на оптичній провідності з'являються піки, які відповідають переходам між зонами та на внутрішцілинні рівні. З оптичного правила сум отримано, що характер температурної поведінки середньої кінетичної енергії у зарядововпорядкованій фазі проявляє аномальну залежність від взаємодії.
3. Розрахунок спектрів нерезонансного непружного розсіяння світла та х-променів показав наявність додаткових піків, що відображають складну зарядову динаміку впорядкованої фази. При дослідженні залежності спектрів розсіяння х-променів від імпульсу передачі в межах першої зони Бриллюена, виявлено, що для різних хвильових векторів інтенсивність розсіяння суттєво змінюється і приймає найбільше значення коли імпульс передачі дорівнює хвильовому вектору впорядкування.
4. З виведеного правила сум для нерезонансного непружного розсіяння х-променів показано, що внесок від потенціальної енергії системи у зарядововпорядкованій фазі пропорційний квадрату параметра порядку (різниці заселеностей підгруп).
5. Спектр резонансного комбінаційного розсіяння світла проявляє складну багатопікову структуру внаслідок наявності внутрішцілинних станів та їхньої сильної температурної залежності у зарядововпорядкованій фазі. Встановлено умови одно- та багатократних резонансів.

СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ

1. *Matveev, O. P.* Optical and dc-transport properties of a strongly correlated charge-density-wave system: Exact solution in the ordered phase of the spinless Falicov-Kimball model with dynamical mean-field theory / O. P. Matveev, A. M. Shvaika, J. K. Freericks // *Phys. Rev.B.* — 2008. — Vol. 77. — P. 035102.
2. *Matveev, O. P.* Nonresonant raman and inelastic x-ray scattering in the charge-density-wave phase of the spinless Falicov-Kimball model / O. P. Matveev, A. M. Shvaika, J. K. Freericks // *Phys. Rev.B.* — 2009. — Vol. 79. — P. 115130.
3. *Matveev, O. P.* Total electronic Raman scattering in the charge-density-wave phase of the Falicov-Kimball model / O. P. Matveev, A. M. Shvaika, J. K. Freericks // *Journal of Physical Studies.* — 2009. — Vol. 13. — Pp. 4703–64710.
4. *Matveev, O. P.* Resonant raman scattering effects in a nesting-driven charge-density-wave insulator: Exact analysis of the spinless Falicov-Kimball model with

- dynamical mean-field theory / O. P. Matveev, A. M. Shvaika, J. K. Freericks // *Phys. Rev. B*. — 2010. — Vol. 82. — P. 155115.
5. *Матвеев, О.* Дослідження оптичних властивостей моделі Фалікова-Кімбала у зарядовопорядкованій фазі / О. Матвеев // VII Всеукраїнська школа-семінар і конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини, Львів, 31 травня - 1 червня, 2007. Збірка тез. — Львів: 2007. — С. 41.
 6. *Matveev, O. P.* Nonresonant electronic Raman and inelastic x-ray scattering and dc-transport of the charge-density-wave phase of the spinless Falicov-Kimball model / O. P. Matveev, A. M. Shvaika, J. K. Freericks // ARW Workshop “Properties and Applications of Thermoelectric Materials”, Hvar, Croatia, September 20-26, 2008. Book of Abstracts. — Hvar, Croatia: 2008. — P. 56.
 7. *Matveev, O. P.* Nonresonant electronic Raman and inelastic x-ray response functions of the charge-density-wave phase of the spinless Falicov-Kimball model / O. P. Matveev, A. M. Shvaika, J. K. Freericks // Proceedings of IV International Conference “Physics of Disordered Systems”, Lviv, October 14-16, 2008. Book of Abstracts. — Lviv: 2008. — Pp. 59–60.
 8. *Shvaika, A. M.* Inelastic electromagnetic wave scattering in the charge-density-wave phase of the spinless Falicov-Kimball model / A. M. Shvaika, J. K. Freericks, O. P. Matveev // Materials XII International Conference “Physics and Technology of Thin Films and Nanosystems”, Ivano-Frankivsk, Ukraine, May 18-23, 2009. — Ivano-Frankivsk, Ukraine: 2009. — P. 286.
 9. *Matveev, O. P.* Raman scattering in the charge-density-wave phase of the spinless Falicov-Kimball model / O. P. Matveev, A. M. Shvaika, J. K. Freericks // The 3RD conference Statistical Physics: Modern Trends and Applications, Lviv, June 23-25, 2009. Programme and abstracts. — Lviv: 2009. — P. 104.
 10. *Матвеев, О.* Транспорт та непружне розсіяння у зарядовопорядкованій фазі / О. Матвеев // X Всеукраїнська школа-семінар і конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини, Львів, 3-4 червня, 2010. Збірка тез. — Львів: 2010. — С. 26.
 11. *Matveev, O. P.* Resonant Raman scattering features in the charge-density-wave phase / O. P. Matveev, A. M. Shvaika, J. K. Freericks // QFS2010 International Symposium on Quantum Fluids and Solids, Grenoble, France, August 1-7, 2010. List of contributions. — Grenoble, France: 2010. — P. 90.
 12. *Швайка, А. М.* Резонансні ефекти комбінаційного розсіяння світла у зарядовопорядкованій фазі / А. М. Швайка, Д. К. Фрірікс, О. П. Матвеев // II Міжнародна школа-конференція “Актуальні проблеми фізики напівпровідників”, Дрогобич, Україна, 28 вересня - 1 жовтня, 2010. Тези доповідей. — Дрогобич, Україна: 2010. — С. 71.
 13. *Matveev, O. P.* Raman scattering in the charge-density-wave phase of the Falicov-Kimball model with dynamical mean-field theory / O. P. Matveev // Young scientists conference “Modern problems of theoretical physics”, Kyiv, Ukraine, December 22-24, 2010. Program and Abstracts. — Kyiv, Ukraine: 2010. — P. 52.
 14. *Matveev, O. P.* Total Raman scattering features in the CDW chess-board phase of the Falicov-Kimball model / O. P. Matveev, A. M. Shvaika, J. K. Freericks //

NATO ARW Workshop “New Materials for Thermoelectric Applications: Theory and Experiment”, Hvar, Croatia, September 19-25, 2011. Book of Abstracts. — Hvar, Croatia: 2011. — P. 29.

АНОТАЦІЯ

Матвєєв О.П. Дослідження непружного розсіяння світла в сильноскорельюваних системах в методі динамічного середнього поля. — На правах рукопису.

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, 2012.

Дисертація присвячена дослідженню впливу зарядового впорядкування на спектри непружного розсіяння електромагнітних хвиль та коефіцієнти переносу у сильноскорельюваній електронній системі в методі динамічного середнього поля. Узагальнено формалізм розрахунку функцій відгуку електронної системи на зовнішнє збурення з використанням багаточасових кореляційних функцій на випадок зарядововпорядкованої фази з подвоєнням періоду ґратки для моделі Фалікова-Кімбала. Отримано, що зарядове впорядкування понижує електропровідність, а спектри оптичної провідності мають багатопікову структуру, яка зумовлена особливостями густини станів. Розраховано нерезонансну функцію відгуку непружного розсіяння світла та x -променів. Отримано, що найбільше наростання відгуку відбувається, коли імпульс передачі дорівнює вектору впорядкування. Виведено правило сум для непружного розсіяння x -променів і встановлено, що внесок від потенціальної енергії у перший частотний момент пропорційний квадрату параметра порядку. Отримано, що особливості густини станів найбільше проявляються на резонансних спектрах комбінаційного розсіяння світла, коли спостерігається наростання відгуку на декілька порядків. З аналітичних виразів встановлено умови одно- та багатократних резонансів.

Ключові слова: *сильноскорельювані електронні системи, теорія динамічного середнього поля, зарядововпорядкована фаза, модель Фалікова-Кімбала, комбінаційне розсіяння, непружне розсіяння x -променів.*

АННОТАЦИЯ

Матвеев О.П. Исследование неупругого рассеяния света в сильноскоррелированных системах в методе динамического среднего поля. — На правах рукописи.

Диссертация на соискание научной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 — теоретическая физика, Институт физики конденсированных систем Национальной академии наук Украины, Львов, 2012.

Диссертация посвящена исследованию влияния зарядового упорядочения на спектры неупругого рассеяния электромагнитных волн и коэффициенты переноса в сильноскоррелированной электронной системе в теории динамического среднего поля. Обобщенно формализм расчета функций отклика электронной системы на

внешние возмущения с использованием многовременных корреляционных функций на случай зарядовоупорядоченной фазы с удвоением периода решетки для модели Фаликова-Кимбала. Получено, что зарядовое упорядочение понижает электропроводность, а спектры оптической проводимости демонстрируют многопиковую структуру, которая обусловлена особенностями плотности состояний. Рассчитано нерезонансную функцию отклика неупругого рассеяния света и рентгеновских лучей. Получено, что наибольшее нарастание отклика происходит когда импульс передачи равен вектору упорядочения. Выведено правило сумм для неупругого рассеяния x -лучей и установлено, что вклад от потенциальной энергии в первый частотный момент пропорционален квадрату параметра порядка. Получено, что особенности плотности состояний больше всего проявляются на резонансных спектрах комбинационного рассеяния света, когда наблюдается нарастание отклика на несколько порядков. С аналитических выражений установлены условия одно- и многократных резонансов.

Ключевые слова: *сильноскоррелированные электронные системы, теория динамического среднего поля, зарядовоупорядоченная фаза, модель Фаликова-Кимбала, комбинационное рассеяние, неупругое рассеяние рентгеновских лучей.*

ABSTRACT

Matveev O.P. Investigation of the inelastic light scattering in strongly correlated systems with dynamical mean-field theory. — Manuscript.

Thesis submitted for the degree of Doctor of Philosophy in physics and mathematics on specialization 01.04.02 — theoretical physics, Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine, Lviv, 2012.

The thesis are devoted to the investigation of the influence of charge ordering on the spectra of inelastic scattering of electromagnetic waves and transport coefficients in strongly correlated electron system within the dynamical mean-field theory. The spinless Falicov-Kimball model on an infinite-dimensional hypercubic lattice is examined. The Falicov-Kimball model is one of the simplest strongly correlated many-body models, which displays rich physics and has an exact solution within dynamical mean-field theory (DMFT), as well as its charge vertex is known. Formalism of calculation of the response functions for Raman scattering based on the multi-time correlation functions in the case of the charge-density-wave (CDW) chessboard phase of the Falicov-Kimball model is developed.

When the temperature is less than T_c , the density of states (DOS) displays strong dependence on temperature. At zero temperature the system is fully ordered and there is a gap (equal to Coulomb interaction) in DOS. Increasing of temperature breaks CDW order and gap becomes fulfilled with subgap states. That DOS features are reflected in the Raman spectra and transport coefficients which also show significant features as function of T . It is obtained that charge ordering reduces electrical and thermal conductivity. Due to the subgap states there is no simple exponential dependency on temperature for dc-conductivity in ordered phase. Spectrum of the optical conductivity shows the multi-peak structure caused by the peculiarities of the DOS. The optical sum rule is also examined and it is found that kinetic energy shows anomalous behavior in the charge-density-wave

phase.

The nonresonant response function for the Raman and inelastic x-ray scattering (when both energy and momentum are transferred) is calculated. Investigation of the wave vector dependency in the first Brillouin zone shows that the largest response occurs when the transferred momentum is equal to the ordering vector. The first-moment sum rules are derived for the inelastic x-ray scattering. It is found that the sum rules are mainly guided by the potential energy, with an access of the CDW order parameter square, in some cases, while in other cases, both the kinetic and potential energy terms contribute.

The resonant Raman scattering response function appears to be very sensitive to the peculiarities of the density of states (it is observed the huge resonant enhancement by the factor of 10^3). There are a large number of strong resonances associated with different peaks of the CDW ordered-phase DOS, which has significant subgap states at low T . The strongest resonance occurs between the states separated by the energy of the Coulomb interaction U corresponding to the $T=0$ gap. Based on the derived analytical expressions the conditions of the one-particle and many-particle resonances are determined. All the investigations are performed for three symmetries often examined in experimental systems with tetragonal symmetry and for different values of Coulomb interaction ranging from a weakly scattering metal to a strongly correlated insulator.

Keywords: *strongly correlated electron systems, dynamical mean-field theory, charge-density-wave phase, Falicov-Kimball model, Raman scattering, inelastic x-ray scattering.*

Підписано до друку 16.05.2012 р. Формат 60з84/16.

Папір друкарський. Умовн. друк. арк. 0,9.

Зам. № 82. Наклад 100 прим.

Видавництво "ПАІС"

Реєстраційне свідоцтво ДК № 3173 від 23 квітня 2008 р.

вул. Гребінки 5, оф. 1, м. Львів, 79007

тел.: (032) 225-60-14, (032) 272-83-98

e-mail: pais@mail.lviv.ua; <http://www.pais.com.ua>