

ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP-04-12U

І.В.Стасюк, Т.С.Мисакович

КОМБІНАЦІЙНЕ РОЗСІЯННЯ СВІТЛА В СИСТЕМАХ З
ЛОКАЛЬНО-АНГАРМОНІЧНИМИ ЕЛЕМЕНТАМИ
СТРУКТУРИ

УДК: 535.375.5

PACS: 71.10.Fd, 72.10.Di, 74.25.Kc

Комбінаційне розсіяння світла в системах з локально-ангармонічними елементами структури

І.В.Стасюк, Т.С.Мисакович

Анотація. Для розрахунку диференціального перерізу комбінаційного розсіяння світла використано мікроскопічну схему, що базується на представленні оператора поляризованості через неусереднену функцію Гріна, побудовану на операторах дипольного моменту системи. Для випадку наближення сильного зв'язку встановлено співвідношення зі стандартними підходами. Досліджено частотну залежність інтенсивності комбінаційного розсіяння світла для псевдоспін-електронної моделі при різних значеннях параметрів моделі та при різних співвідношеннях між поляризацією падаючого та розсіяного світла. Враховано псевдоспінові та електронні внески в розсіяння.

Raman scattering in systems with locally anharmonic elements of structure

I.V.Stasyuk, T.S.Mysakovych

Abstract. The microscopic approach, which is based on presentation of polarizability operator using unaveraged Green's functions built on dipole moment operators, is used to calculate the cross-section of Raman scattering. For the case of strong coupling approximation the relation of this method with standard approach is revealed. Frequency dependence of Raman scattering intensity for different values of model parameters and for different polarization of scattering and incident light is investigated. Pseudospin and electron contributions to scattering are taken into account.

1. Вступ

Комбінаційне розсіяння (КР) світла є потужним інструментом для дослідження елементарних збуджень в різних системах, оскільки воно є досить чутливим до проявів спінових, електронних та фононних ступенів вільності. КР пов'язане із передачею енергії від кванта світла (та зміною його хвильового вектора) до кристалу завдяки присутності низькочастотних збуджень - фононів або низькоенергетичних електронних переходів. За допомогою фононного КР можна вивчати тонкі деталі структури фононних спектрів та отримувати інформацію про зміни в локальній структурі окремих центрів чи самої ґратки. Кілька десятиліть за допомогою КР досліджується ґраткова динаміка і, разом з тим, порівняно недавно досліджується електронне КР в металах, діелектриках, напівпровідниках та надпровідниках. КР світла є важливим засобом дослідження систем з сильними електронними кореляціями, які володіють рядом особливих властивостей (нефермі-рідинна поведінка електронів, фазові переходи з модуляцією зарядової густини та зміною валентності, переходи метал-діелектрик і т.д.).

При появі в системі антиферомагнітного стану можливим є розсіяння на магнонах. Двомаггонне розсіяння було розглянено ще в 60-х роках в роботах Флюрі і Лоудона [1] за допомогою феноменологічного гамільтоніану розсіяння. На початку 90-х років Шастрі і Шрайман розглядали внески такого типу на мікроскопічному рівні для випадку моделі Хаббарда [2]. Детальна теорія двомаггонного розсіяння в діелектриках для резонансного та нерезонансного випадків була розроблена в роботі [3].

Багато робіт (як експериментальних так і теоретичних) виконано з метою дослідження низькочастотної динаміки високотемпературних надпровідників (системи типу YBaCuO та інші [4, 5], див. огляди [6–8]), де крім фононних ліній виділяють смуги, викликані електронними переходами у неперервному спектрі. При цьому також відзначається, що фононні лінії мають ускладнену структуру та зазнають деформації внаслідок ефекту неадиабатичності та змін в електронній густині [9, 10]. Так, зокрема, у роботі [9] було показано, що експериментальні результати з розсіяння, пов'язані із коливаннями Ва та Cu, можна відтворити, врахувавши взаємодію фононів із деяким континуумом збуджень. Цей континуум пов'язувався із низькоенергетичними електронними міжзонними переходами. Температурна залежність спектрів мінялася зі зміною заселеності електронних зон. Було відзначено, що отриманий спектр дещо відрізняється від того, який можна знайти, використовуючи адиабатичне наближення.

Також авторами було відзначено, що кристали типу YBaCuO містять мікрофазні домени, тому у спектрі розсіяння будуть присутні внески від різних фаз. Разом з тим, природа спектру з високочастотного боку від моди 500 cm^{-1} (порядку $540 - 570 \text{ cm}^{-1}$) є все ще до кінця нез'ясованою. Авторами [10] було відзначено, що вплив електронного континууму проявляється у спектрах у вигляді слабкого широкого піку, що знаходиться у області частот порядку 200 cm^{-1} . У якості можливого механізму розсіяння було запропоновано збудження електрон-діркових пар з великим імпульсом. Крім цього, електронний внесок у розсіяння у ненадпровідній фазі проявляється також у вигляді широкого континууму, що тягнеться від майже нульових енергій і аж до енергій порядку 1 eV (див. огляд [6]). Такий континуум спостерігається для випадку поляризації світла у площині ab (для YBaCuO це площина, паралельна CuO₂) та у напрямку осі c (перпендикулярно ab), причому для напрямку вздовж осі c вважається, що в такому розсіянні приймають участь фонони (зокрема ті, що пов'язані з коливаннями апексного кисню O4). При цьому припускається, що присутність фононів сприяє переносу електронів між різними площинами. Механізм такого розсіяння залишається до кінця нез'ясованим.

У роботі [5] зазначалося, що складність структури фононних ліній у спектрі може бути пов'язана із співіснуванням мікрофаз в кристалах типу YBaCuO (це, зокрема, фононний спектр, пов'язаний із коливаннями апексного кисню O4). Тому результуючий спектр буде накладанням спектрів співіснуючих фаз. Крім цього також відзначено, що розташування та максимум піку залежать від частоти падаючого світла та від ступеня легування.

Дослідження, проведені у роботах [11–13], були присвячені розрахункам фононних внесків в комбінаційне розсіяння світла для випадку кристалів типу YBaCuO. У роботі [11] за допомогою ab-initio розрахунків було розраховано зонну структуру та коливні потенціали в межах адиабатичного наближення. Порівняння результатів, отриманих в адиабатичному наближенні та з застосуванням теорії збурень, було здійснене в роботі [12]. Виявилось, що якісно результати є досить подібними, хоча кількісно вони дещо відрізняються. У цих дослідженнях було враховано, що механізм комбінаційного розсіяння є пов'язаний із електронними станами в киснево-мідних ланцюжках, причому електронний перенос (що формував зони) та взаємодія електронів з фононами враховувалися для згаданих вже ланцюжків. Решта системи, зокрема площини CuO₂, відігравали роль

термостату (зарядового резервуару зокрема), рівень Фермі був спільним для киснево-мідних ланцюжків та площин CuO_2 . При певних значеннях частоти падаючого світла наступав резонанс, при цьому частота світла була порядку величини енергії переходу між електронними зонами. Було зроблено висновок, що підхід, базований на теорії збурень, дає більш коректні результати ніж адіабатичний підхід при розрахунку перерізу розсіяння. Усі активні при КР фононні моди YBaCuO були розраховані за допомогою методу функціоналу густини [13]. Було встановлено, що інтенсивності для випадку поляризацій в площині xy є більш ніж на порядок меншими ніж для випадку поляризацій в zz напрямку (напрямок коливань апексного кисню), при цьому зсув апексного кисню має найсильніший вплив на електронні стани і приводить до найбільшої інтенсивності фононної лінії, пов'язаної з коливаннями O_4 для zz поляризації.

Фононні аномалії, пов'язані із немонотонною залежністю фононної частоти для надпровідних кристалів були досліджені також в рамках моделі Хаббарда-Голстейна [14]. За допомогою теорії динамічного середнього поля було виявлено, що завдяки електрон-фононній взаємодії фононна частота зсувається і цей зсув залежить від температури.

Досліджуються також внески одночастинкових та колективних збуджень в КР [15, 16], при цьому встановлюються умови виникнення резонансного розсіяння [16]. Так, зокрема, в роботі [16] було виявлено, що для зонних електронів з кулонівською взаємодією в довгохвильовій границі ($\vec{q} \rightarrow 0$, де \vec{q} – хвильовий вектор світла) при нерезонансному розсіянні проявлятимуться лише колективні збудження зарядової густини (плазмони), в той час як одночастинкові електрон-діркові збудження будуть давати внесок лише тоді, коли частота падаючого світла є близькою до міжзонної щільності (умова резонансу).

Останнім часом проблема теоретичного опису електронного КР стала актуальною завдяки появі нових методів теоретичного дослідження моделей, що використовуються в теорії сильноскорельованих електронних систем, а також завдяки розширенню експериментальних досліджень в цій області та появі нової експериментальної техніки. Окремо можна виділити дослідження, присвячені вивченню КР поблизу переходу метал-діелектрик [17–19]. З цією метою як базові використовують моделі Фалікова-Кімбала (ФК) та Хаббарда, оскільки в таких моделях при певному підборі параметрів може наступити згаданий перехід. Виходячи з представлення Шастрі і Шраймана для оператора поляризованості, дослідження, проведені на основі методу динамічного середнього поля (який є точним в

границі $d \rightarrow \infty$), виявили присутність так званого піку зарядового переносу та піку низькоенергетичних збуджень, а також існування ізобестичної точки в спектрі КР. Було розглянено окремо резонансні, нерезонансні та змішані внески в КР, резонанс наступав при частоті падаючого світла, близькій до частоти, що відповідає константі локальної взаємодії між частинками [20].

Для кращого розуміння процесів, що відбуваються при КР світла в сильноскорельованих системах, представляє інтерес розвиток наближених схем рахунку перерізу КР. Ми зупинимось на двох варіантах побудови оператора поляризованості КР: перший полягає у розкладі за степенями електронного переносу, другий – у певних наближеннях, що робляться при написанні рівнянь для неусереднених функцій Гріна. У роботі [21] в рамках першого з цих підходів було досліджено частотну залежність інтенсивності розсіяння при різних значеннях параметрів теорії для псевдоспін-електронної моделі (ПЕМ). Був розглянений випадок сильної псевдоспін-електронної взаємодії при врахуванні лише псевдоспінного внеску в дипольний момент. У даній роботі ми хочемо дати більш детальний аналіз методу, який ми використовуємо для опису КР світла. Будуть враховані електронні внески в дипольний момент для ПЕМ, дослідимо також випадок слабкої псевдоспін-електронної взаємодії, буде отримано вираз для оператора поляризованості для моделі ФК в межах запропонованого нами підходу.

2. Диференціальний переріз розсіяння

При непружному розсіянні світла визначальними є часово залежні флуктуації електронного відгуку середовища на падаючу електромагнітну хвилю. Звичайно такий відгук описується електронною поляризованістю, тому при розсіянні важливими є її зміни внаслідок руху іонів (фононне КР) або завдяки квантовим переходам між електронними станами (електронне КР).

Будемо виходити з гамільтоніану взаємодії електронів кристалу з поперечною електромагнітною хвилею з векторним потенціалом $\vec{A}(\vec{r}, t)$:

$$\begin{aligned}
 H &= H + H_{int} \\
 H_{int} &= \frac{e}{c} \sum_{q, \omega} \vec{v}(-\vec{q}) \vec{A}(\vec{q}, \omega) + \\
 &+ \frac{e^2}{2mc^2} \sum_{q\omega} \sum_{q'\omega'} N(-\vec{q} - \vec{q}') \vec{A}(\vec{q}, \omega) \vec{A}(\vec{q}', \omega'), \quad (1)
 \end{aligned}$$

де $N(\vec{q})$, $\vec{v}(\vec{q})$ є фур'є-образами операторів густини та швидкостей частинок. Вираз для H_{int} отриманий через заміну $\vec{p}_j \rightarrow \vec{p}_j + \frac{e}{c}\vec{A}(\vec{r}_j)$ для i - частинки у доданку гамільтоніану кристалу H , що відповідає кінетичній енергії електронів. Після проведення квантування електромагнітного поля та використання теорії збурень за степенями вектора \vec{A} у другому порядку (при цьому враховуються процеси поглинання фотона з частотою ω_1 , хвильовим вектором \vec{q}_1 і вектором поляризації \vec{e}_1 та випромінювання фотона з частотою ω_2 , хвильовим вектором \vec{q}_2 і вектором поляризації \vec{e}_2) отримується (див. напр. [6, 22]) вираз для диференціального перерізу розсіяння:

$$\frac{\partial^2 \sigma}{\partial \Omega \partial \omega_2} = \frac{\omega_2^4}{c^4} \left(\frac{\omega_2}{\omega_1} \right) \frac{n_2}{n_1} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dt}{2\pi} e^{i\omega t} V^2 \langle \chi_{21}^+(t) \chi_{21}(0) \rangle \equiv \frac{\omega_2^4}{c^4} \left(\frac{\omega_2}{\omega_1} \right) \sum_{\alpha\alpha'} \rho(E_\alpha) \delta[(E_{\alpha'} - E_\alpha)/\hbar - \omega] V^2 |\langle \alpha' | \chi_{21} | \alpha \rangle|^2, \quad (2)$$

де n_1, n_2 - показники заломлення, V - об'єм, що розсіює, $E_\alpha, |\alpha\rangle$ - власні значення енергії та власні стани гамільтоніану H ; $\rho(E_\alpha) = Z^{-1} \exp(-\beta E_\alpha)$ - власні значення статистичного оператора при усередненні за розподілом Гіббса;

$$\begin{aligned} \chi_{21} &= \sum_{\mu\nu} e_{2\mu} \chi_{\mu\nu}(\omega_1, \omega_2, \vec{q}_1, \vec{q}_2) e_{1\nu} \\ \chi_{21}(t) &= e^{\frac{i}{\hbar} H t} \chi_{21} e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \\ \omega &= \omega_2 - \omega_1, \end{aligned} \quad (3)$$

$\chi_{\mu\nu}$ -тензор електронної поляризованості (сприйнятливості) переходу, який є оператором, що діє у просторі електронних станів. Тензор $\chi_{\mu\nu}$, усереднений за розподілом Гіббса, при покладанні $\omega_1 = \omega_2$, $\vec{q}_1 = \vec{q}_2$, дає звичайну поперечну електронну сприйнятливість при заданих значеннях частоти і хвильового вектора. При низьких температурах ($T \rightarrow 0$) присутні лише внески з частотами $\omega_2 < \omega_1$ - це так звані стоксові компоненти розсіяння, що визначаються спектром низько-частотних збуджень в системі. Якщо частота фотона є близькою до частоти переходу у проміжні стани (при врахуванні другого порядку внесків в розсіяння), то деякі складові, що формують переріз розсіяння, мають резонансний характер. Інтенсивність розсіяння у цьому випадку суттєво залежить від частоти фотона.

Якщо розглянути випадок взаємодії заряджених частинок з електромагнітним полем, то за допомогою теорії збурень можна отримати наступний вираз для матричного елемента електронної поля-

ризованості [6, 22]:

$$\begin{aligned} \langle \alpha' | \chi_{\mu\nu} | \alpha \rangle &= -\frac{e^2}{m\omega_2^2} \frac{1}{V} \langle \alpha' | N(\vec{q}_1 - \vec{q}_2) | \alpha \rangle \delta_{\mu\nu} - \\ &\frac{e^2}{\omega_2^2} \frac{1}{V} \frac{c^2}{e^2} \sum_{\alpha''} \left[\frac{\langle \alpha' | Q_\mu(-\vec{q}_2) | \alpha'' \rangle \langle \alpha'' | Q_\nu(\vec{q}_1) | \alpha \rangle}{E_\alpha - E_{\alpha''} + \hbar\omega_1} - \right. \\ &\left. \frac{\langle \alpha' | Q_\nu(\vec{q}_1) | \alpha'' \rangle \langle \alpha'' | Q_\mu(-\vec{q}_2) | \alpha \rangle}{E_{\alpha''} - E_\alpha + \hbar\omega_2} \right]. \end{aligned} \quad (4)$$

Для системи частинок

$$\begin{aligned} N(\vec{q}_1 - \vec{q}_2) &= \sum_j e^{-i(\vec{q}_1 - \vec{q}_2) \cdot \vec{r}_j} \\ \vec{Q}(-\vec{q}) &= -\frac{e}{2mc} \sum_j (\vec{p}_j e^{-i\vec{q}\vec{r}_j} + e^{-i\vec{q}\vec{r}_j} \vec{p}_j) = \frac{\hbar e}{2mc} \vec{q} N(\vec{q}) - \frac{e}{c} \vec{v}(\vec{q}) \\ \vec{v}(\vec{q}) &= \sum_j e^{-i\vec{q}\vec{r}_j} \left(-\frac{i\hbar}{m} \vec{\nabla}_j \right); \quad \vec{p}_j = -i\hbar \vec{\nabla}_j \end{aligned} \quad (5)$$

тут $N(\vec{q})$, $\vec{Q}(\vec{q})$ - фур'є образи густини та потоків (з точністю до коефіцієнта) частинок. Для поперечної хвилі (вектор поляризації \vec{e})

$$\sum_\mu e^\mu Q_\mu(-\vec{q}) = -\frac{e}{c} \sum_\mu e^\mu v_\mu(\vec{q}) \quad (6)$$

Перейшовши до матричних елементів швидкостей, матимемо

$$\begin{aligned} \langle \alpha' | \chi_{\mu\nu} | \alpha \rangle &= -\frac{e^2}{m\omega_2^2} \frac{1}{V} \langle \alpha' | N(\vec{q}_1 - \vec{q}_2) | \alpha \rangle \delta_{\mu\nu} - \frac{e^2}{\omega_2^2} \frac{1}{V} \times \\ &\sum_{\alpha''} \left[\frac{\langle \alpha' | v_\mu(\vec{q}_2) | \alpha'' \rangle \langle \alpha'' | v_\nu(-\vec{q}_1) | \alpha \rangle}{E_\alpha - E_{\alpha''} + \hbar\omega_1} - \frac{\langle \alpha' | v_\nu(-\vec{q}_1) | \alpha'' \rangle \langle \alpha'' | v_\mu(\vec{q}_2) | \alpha \rangle}{E_{\alpha''} - E_\alpha + \hbar\omega_2} \right] \end{aligned} \quad (7)$$

Цей вираз є вихідним при розгляді на основі різних підходів електронного КР світла (див. [6, 22]). Як видно з цього виразу, постає проблема розрахунку власних станів та власних енергій системи.

Другий доданок у формулі (7) можна переписати через матричні елементи оператора

$$\begin{aligned} \Pi_{\vec{q}_2, -\vec{q}_1}^{\mu\nu}(\omega_1, t) &= -2\pi \int_{-\infty}^{+\infty} ds e^{i\omega_1(t-s)} \{ \{ v_\mu(\vec{q}_2, t) | v_\nu(-\vec{q}_1, s) \} \}, \\ v_\nu(-\vec{q}_1, s) &= e^{\frac{i}{\hbar} H s} v_\nu(-\vec{q}_1) e^{-\frac{i}{\hbar} H s}. \end{aligned} \quad (8)$$

Тут символом $\{\{\dots|\dots\}\}$ позначено "неусереднену" функцію Гріна, означену у такий спосіб [23]:

$$\{\{A(t)|B(t')\}\} = -i\Theta(t-t')[A(t), B(t')], \quad (9)$$

Рівняння руху для цієї функції мають вигляд

$$\hbar\omega_1\{\{A|B\}\}_{\omega_1, \omega_2} = \frac{\hbar}{2\pi}[A, B]_{\omega_1 - \omega_2} + \{\{[A, H]|B\}\}_{\omega_1, \omega_2} \quad (10)$$

$$\hbar\omega_2\{\{A|B\}\}_{\omega_1, \omega_2} = \frac{\hbar}{2\pi}[A, B]_{\omega_1 - \omega_2} - \{\{A|[B, H]\}\}_{\omega_1, \omega_2},$$

де

$$\{\{A|B\}\}_{\omega_1, \omega_2} = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-\infty}^{+\infty} ds e^{i\omega_1 t} e^{-i\omega_2 s} \{\{A(t)|B(s)\}\}$$

$$A_\omega = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t} A(t).$$

Використавши інтегральне представлення для функції Хевісайда $\Theta(s)$

$$\Theta(-s) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{x + i\varepsilon} e^{isx} \quad (11)$$

отримаємо

$$\langle \alpha' | \Pi_{\vec{q}_2, -\vec{q}_1}^{\mu\nu}(\omega_1, 0) | \alpha \rangle = \hbar \sum_{\alpha''} \left[\frac{\langle \alpha' | v_\mu(\vec{q}_2) | \alpha'' \rangle \langle \alpha'' | v_\nu(-\vec{q}_1) | \alpha \rangle}{E_{\alpha''} - E_\alpha - \hbar\omega_1 - i\varepsilon} - \frac{\langle \alpha' | v_\nu(-\vec{q}_1) | \alpha'' \rangle \langle \alpha'' | v_\mu(\vec{q}_2) | \alpha \rangle}{E_{\alpha''} - E_\alpha - \hbar\omega_1 - i\varepsilon} \right] \quad (12)$$

Таким чином,

$$\langle \alpha' | \chi_{\mu\nu} | \alpha \rangle = -\frac{e^2}{m\omega_2^2} \frac{1}{V} \langle \alpha' | N(\vec{q}_1 - \vec{q}_2) | \alpha \rangle \delta_{\mu\nu} + \frac{e^2}{\hbar\omega_2^2} \frac{1}{V} \langle \alpha' | \Pi_{\vec{q}_2, -\vec{q}_1}^{\mu\nu}(\omega_1, 0) | \alpha \rangle \quad (13)$$

при цьому було враховано зв'язок між частотою розсіяного і падаючого світла: $\hbar\omega_1 + E_\alpha = \hbar\omega_2 + E'_\alpha$. Для випадку кристалу структура

виразу (13) зберігається, однак перший доданок при цьому перенормується і набуває вигляду, що визначається законом дисперсії для зонної енергії; цей член дає вклад в нерезонансне розсіяння (див. нижче). Другий доданок відіграє важливу роль при резонансному розсіянні.

Перейдемо у виразі для оператора Π від неусереднених функцій Гріна на операторах швидкостей до функцій на операторах координат $\vec{R}(\vec{q}) = \sum_j e^{-i\vec{q}\vec{r}_j} \vec{r}_j$. Використовуючи рівняння руху (10), матимемо

$$\{\{v_\mu(\vec{q}_2)|v_\nu(-\vec{q}_1)\}\}_{\omega'_1, \omega_1} = -\frac{i}{2\pi} [v_\nu(-\vec{q}_1), R_\mu(\vec{q}_2)]_{\omega'_1 - \omega_1} + \omega'_1 \omega_1 \{\{R_\mu(\vec{q}_2)|R_\nu(-\vec{q}_1)\}\}_{\omega'_1, \omega_1} \quad (14)$$

(оскільки $[\vec{R}(\vec{q}), H] = i\hbar\vec{v}(\vec{q})$ в границі $\vec{q}_2, \vec{q}_1 \rightarrow 0$) і тоді

$$\Pi_{\vec{q}_2, -\vec{q}_1}^{\mu\nu}(\omega_1, t) = i[v_\nu(-\vec{q}_1), R_\mu(\vec{q}_2)]_t - 2\pi \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega'_1 e^{i(\omega_1 - \omega'_1)t} \omega'_1 \omega_1 \{\{R_\mu(\vec{q}_2)|R_\nu(-\vec{q}_1)\}\}_{\omega'_1, \omega_1} \quad (15)$$

В границі $\vec{q}_2, \vec{q}_1 \rightarrow 0$, що відповідає дипольному наближенню,

$$[v_\nu(-\vec{q}_1), R_\mu(\vec{q}_2)] = -\frac{i\hbar}{m} \delta_{\nu\mu} N(-\vec{q}_1 + \vec{q}_2). \quad (16)$$

Розглянемо неусереднену функцію Гріна $\{\{R_\mu|R_\nu\}\}$, переписавши оператори R_μ, R_ν через оператори Хаббарда, що діють на базисі власних станів гамільтоніану системи $H = \sum_i \lambda_i X^{ii}$:

$$R_\mu(\vec{q}_2) = \sum_{ik} \langle i | R_\mu(\vec{q}_2) | k \rangle X^{ik}, \\ R_\nu(-\vec{q}_1) = \sum_{ik} \langle i | R_\nu(-\vec{q}_1) | k \rangle X^{ik}. \quad (17)$$

Використовуючи рівняння руху, можемо отримати

$$\{\{X^{ik}|X^{lm}\}\}_{\omega'_1, \omega_1} = \frac{\hbar}{2\pi} \frac{[X^{ik}, X^{lm}]_{\omega'_1 - \omega_1}}{\hbar\omega'_1 - \lambda_{ki}} \quad (18)$$

Врахувавши гейзенбергівське представлення для операторів Хаббарда $X^{ik}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\lambda_{ik}t} X^{ik}$, запишемо для комутатора:

$$[X^{ik}, X^{lm}]_{\omega'_1 - \omega_1} = \delta_{kl} \delta(\omega'_1 - \omega_1 + \lambda_{im}/\hbar) X^{im} - \delta_{mi} \delta(\omega'_1 - \omega_1 + \lambda_{lk}/\hbar) X^{lk}. \quad (19)$$

В результаті

$$\{\{R_\mu(\vec{q}_2)|R_\nu(-\vec{q}_1)\}\}_{\omega'_1, \omega_1} = \frac{\hbar}{2\pi} \sum_{ik} \sum_{lm} \langle i|R_\mu(\vec{q}_2)|k\rangle \langle l|R_\nu(-\vec{q}_1)|m\rangle \times \frac{[X^{ik}, X^{lm}]_{\omega'_1 - \omega_1}}{\hbar\omega'_1 - \lambda_{ki}} \quad (20)$$

Інтегрування по частоті ω'_1 в виразі (15) зніметься завдяки δ -функціям (як видно з (19) та (20)); після інтегрування ми прийдемо до виразу:

$$\begin{aligned} \Pi_{\vec{q}_2, -\vec{q}_1}^{\mu\nu}(\omega_1, t) &= \frac{\hbar}{m} \delta_{\mu\nu} N(-\vec{q}_1 + \vec{q}_2)t - \\ &\omega_1\omega_2 \sum_{imk} \hbar \left(\frac{\langle i|R_\mu(\vec{q}_2)|k\rangle \langle l|R_\nu(-\vec{q}_1)|m\rangle}{\hbar\omega_1 - \lambda_{km}} - \right. \\ &\left. \frac{\langle i|R_\nu(-\vec{q}_1)|k\rangle \langle k|R_\mu(\vec{q}_2)|m\rangle}{\hbar\omega_1 - \lambda_{ik}} \right) X^{im}(t), \end{aligned} \quad (21)$$

причому тут було враховано згадану вище умову збереження енергії $\hbar\omega_1 + \lambda_m = \hbar\omega_2 + \lambda_i$. Ввівши згідно означення

$$\begin{aligned} 2\pi \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega'_1 e^{i(\omega_1 - \omega'_1)t} \{\{R_\mu(\vec{q}_2)|R_\nu(-\vec{q}_1)\}\}_{\omega'_1, \omega_1} &\equiv \\ &\equiv -\frac{1}{e^2} P_{\vec{q}_2, -\vec{q}_1}^{\mu\nu}(\omega_1, t) \end{aligned} \quad (22)$$

оператор $P_{\vec{q}_2, -\vec{q}_1}^{\mu\nu}$, можемо записати

$$\Pi_{\vec{q}_2, -\vec{q}_1}^{\mu\nu}(\omega_1, t) = \frac{\hbar}{m} \delta_{\mu\nu} N(-\vec{q}_1 + \vec{q}_2)t + \frac{\omega_1\omega_2}{e^2} P_{\vec{q}_2, -\vec{q}_1}^{\mu\nu}(\omega_1, t). \quad (23)$$

В результаті для матричних елементів оператора поляризованості матимемо

$$\langle \alpha' | \chi^{\mu\nu} | \alpha \rangle = \frac{\omega_1}{\hbar\omega_2 V} \langle \alpha' | P_{\vec{q}_2, -\vec{q}_1}^{\mu\nu}(\omega_1, 0) | \alpha \rangle \quad (24)$$

Таким чином, в границі $\vec{q}_1, \vec{q}_2 \rightarrow 0$ оператор поляризованості виражається через інтеграл по частоті від неусередненої функції Гріна, побудованої на фур'є-образах електронних дипольних моментів $e\vec{R}(\vec{q})$.

З приведених вище формул видно, що можуть бути два альтернативні підходи для розрахунку оператора поляризованості. Перший підхід (при використанні співвідношення (13)) є більш загальним і

може використовуватися при описі розсіяння з $\vec{q} \neq 0$ (це, зокрема, рентгенівський діапазон хвиль). Другий (при використанні формули (24), яка є справедливою при $\vec{q}_1, \vec{q}_2 \rightarrow 0$), що використовувався в роботах [21, 24], є зручним при побудові явного вигляду оператора поляризованості шляхом операторних розкладів.

Для диференціального перерізу розсіяння у другому підході звичайно записується такий вираз (див. [21, 23-25]):

$$\frac{\partial^2 \sigma}{\partial \Omega \partial \omega_2} = \frac{\omega_2^3 \omega_1 n_2}{\hbar^2 c^4 n_1} \sum_{\alpha\beta\alpha'\beta'} e_{1\alpha} e_{2\beta} e_{1\alpha'} e_{2\beta'} H_{k_2, k_1}^{\beta'\alpha', \beta, \alpha}(\omega_1, \omega_2), \quad (25)$$

де тензор розсіяння має вигляд

$$\begin{aligned} H_{k_2, k_1}^{\beta'\alpha', \beta, \alpha}(\omega_1, \omega_2) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i(\omega_1 - \omega_2)t} \times \\ &\langle \hat{P}_{\vec{k}_2 - \vec{k}_1}^{\beta'\alpha'}(-\omega_1, t) \hat{P}_{-\vec{k}_2, \vec{k}_1}^{\beta\alpha}(\omega_1, 0) \rangle, \end{aligned} \quad (26)$$

при цьому

$$[P_{\vec{k}', \vec{k}}^{\beta\alpha}(\omega, t)]^+ = P_{-\vec{k}', -\vec{k}}^{\beta\alpha}(-\omega, t). \quad (27)$$

Така властивість оператора поляризованості забезпечує виконання нерівності $\frac{\partial^2 \sigma}{\partial \Omega \partial \omega_2} \geq 0$.

3. Наближення сильного зв'язку

Розглянемо випадок електронів, що описуються локалізованими функціями (наближення сильного зв'язку). Ввівши одночастинковий базис для електронів $|n\rangle \equiv \phi_n(\vec{r})$ (ортогоналізовані орбітально невироджені атомні функції), можемо записати у представленні вторинного квантування гамільтоніан не взаємодіючих електронів:

$$H_0 = E_0 \sum_n a_n^+ a_n + \sum_{nm} t_{nm} a_n^+ a_m, \quad (28)$$

t_{nm} - інтеграл перескоку. Перейшовши до k - простору

$$a_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{i\vec{k}\vec{R}_n} \alpha_k \quad (29)$$

отримаємо

$$H_0 = \sum_k (E_0 + t(\vec{k})) \alpha_k^+ \alpha_k \equiv \sum_k \epsilon_k \alpha_k^+ \alpha_k \quad (30)$$

Для оператора фур'є-образу координати у представленні вторинного квантування

$$\vec{R}(\vec{q}) = \sum_{nn'm} \langle n|e^{-i\vec{q}\vec{r}}|m\rangle \langle m|\vec{r}|n'\rangle a_n^+ a_{n'}, \quad (31)$$

врахувавши

$$\langle n|e^{-i\vec{q}\vec{r}}|m\rangle \approx \delta_{mn} e^{-i\vec{q}\vec{R}_m}; \quad \langle m|\vec{r}|n'\rangle \approx \delta_{mn'} \vec{R}_m, \quad (32)$$

матимемо

$$\vec{R}(\vec{q}) = \sum_n e^{-i\vec{q}\vec{R}_n} \vec{R}_n a_n^+ a_n. \quad (33)$$

Для представлення оператора дипольного моменту $\vec{P}(\vec{q})$ використовуємо зв'язок між матричними елементами

$$\langle m| -i\hbar\nabla |n'\rangle = \frac{m}{i\hbar} (\vec{R}_m - \vec{R}'_n) t_{mn'} \quad (34)$$

(оскільки $-i\hbar\nabla = \frac{m}{i\hbar} [\vec{r}, H_0]$). Тоді можна записати

$$P_\alpha(\vec{q}) = \frac{m}{\hbar} \sum_k \frac{\partial \epsilon_k}{\partial k_\alpha} \alpha_{k-q/2}^+ \alpha_{k+q/2}. \quad (35)$$

Видно, що у даному наближенні

$$\begin{aligned} [\vec{R}(\vec{q}), H_0] &= \frac{i\hbar}{m} \vec{P}(\vec{q}) = i\hbar \vec{v}(\vec{q}) \\ [P_\alpha(\vec{q}_1), R_\beta(\vec{q}_2)] &= -\frac{im}{\hbar} \sum_k \frac{\partial^2 \epsilon_k}{\partial k_\alpha \partial k_\beta} \alpha_{k-\frac{\vec{q}_1+\vec{q}_2}{2}}^+ \alpha_{k+\frac{\vec{q}_1+\vec{q}_2}{2}}. \end{aligned} \quad (36)$$

Наведені тут результати є справедливими і для випадку присутності міжелектронної взаємодії.

В прийнятому наближенні (до розгляду взято одну орбітально невироджену електронну зону у наближенні сильного зв'язку) можемо переписати (14) у вигляді

$$\begin{aligned} \{ \{ R_\mu(\vec{q}_2) | R_\nu(-\vec{q}_1) \} \}_{\omega'_1 \omega_1} &= \frac{1}{\omega'_1 \omega_1} \{ \{ v_\mu(\vec{q}_2) | v_\nu(-\vec{q}_1) \} \}_{\omega'_1 \omega_1} + \\ \frac{1}{2\pi\hbar} \frac{1}{\omega'_1 \omega_1} \gamma_{\nu\mu}(\vec{q}_2 - \vec{q}_1) |_{\omega'_1 - \omega_1} & \end{aligned} \quad (37)$$

де

$$\gamma_{\mu\nu}(\vec{q}_2 - \vec{q}_1) = \sum_k \frac{\partial^2 \epsilon_k}{\partial k_\nu \partial k_\mu} \alpha_{k-\frac{\vec{q}_2-\vec{q}_1}{2}}^+ \alpha_{k+\frac{\vec{q}_2-\vec{q}_1}{2}}. \quad (38)$$

Перейшовши до операторів $P(\omega, t)$ та $\Pi(\omega, t)$ (формули (22) та (8), відповідно), матимемо таке співвідношення:

$$P_{\vec{q}_2, -\vec{q}_1}^{\mu\nu}(\omega_1, t) = -\frac{e^2}{\hbar\omega_1\omega_2} \gamma_{\mu\nu}(\vec{q}_2 - \vec{q}_1)|_t + \frac{e^2}{\omega_1\omega_2} \Pi_{\vec{q}_2, -\vec{q}_1}^{\mu\nu}(\omega_1, t), \quad (39)$$

причому тут інтегрування по частоті ω'_1 було виконано за допомогою описаної вже процедури (див. формули (15)-(22)). В результаті оператор поляризованості набуває форму

$$\chi_{\mu\nu}(t) = -\frac{1}{V} \frac{e^2}{\hbar^2\omega_2^2} \gamma_{\mu\nu}(\vec{q}_2 - \vec{q}_1)|_t + \frac{1}{V} \frac{e^2}{\hbar\omega_2^2} \Pi_{\vec{q}_2, -\vec{q}_1}^{\mu\nu}(\omega_1, t). \quad (40)$$

Такий запис тензора χ використовується для опису електронного КР на зонних електронах у напівпровідниках та сильно скорельованих (Мотт-Хаббардівських) системах [17]. Перший доданок в (40) дає вклад в нерезонансне розсіяння (при цьому тензор напружень $\gamma_{\mu\nu}(\vec{q})$ є ефективною вершиною), другий - в резонансне розсіяння (ефективними вершинами є оператори струму $j_\alpha(\vec{q}) = \hbar v_\alpha(\vec{q})$), при змішаному розсіянні будуть присутні як вершини з $\gamma_{\mu\nu}(\vec{q})$ так і з $j_\alpha(\vec{q})$.

У довгохвильовому наближенні ($q \rightarrow 0$) у вираз для γ входить тензор оберненої ефективної маси. Такого вигляду нерезонансну складову можна отримати за рахунок перенормування, що пов'язане із внесками від електронних переходів до інших зон у виразі типу (7) для тензора поляризованості (див. [6, 26]). У нашому підході такий результат отримується в рамках наближення сильного зв'язку при виділенні одного орбітального стану на атомі (одної електронної зони) і наближеного розрахунку матричних елементів. Слід зауважити, що за рахунок прийнятої апроксимації сумування в (12) проводиться лише по станах підпростору, на якому діє оператор енергії однозонної моделі.

Підсумовуючи отримані результати, можемо відзначити наступне. Можна розглядати два способи для знаходження оператора поляризованості. У першому підході треба користуватися співвідношенням (24), при цьому необхідно буде розраховувати "неусереднені" функції Гріна, побудовані на операторах дипольного моменту.

При використанні другого підходу необхідно користуватися формулою (40), тоді одразу виділяють нерезонансні (перший доданок у формулі (40)) та резонансні (другий доданок у формулі (40)) внески в розсіяння. В першому підході резонансні та нерезонансні внески з'являться при розрахунку "неусереднених" функцій Гріна, побудованих на операторах дипольного моменту. Ми показали, що в границі $q \rightarrow 0$ ці два методи знаходження оператора поляризованості є еквівалентними.

Виразивши оператор поляризованості $\chi_{\mu\nu}$ через неусереднені функції Гріна, можемо розвивати певні схеми його побудови, застосовуючи наближенні способи розрахунку цих функцій. Далі на прикладі моделі Фалікова-Кімбала та псевдоспін-електронної моделі буде розглянено два різні способи отримання оператора поляризованості. Один з них базується на розкладах за степенями електронного переносу (цей спосіб буде застосовано для випадку сильної псевдоспін-електронної взаємодії в ПЕМ а також для моделі Фалікова-Кімбала), інший - на деяких способах розщеплень у рівняннях руху для неусереднених функцій Гріна (випадок слабкої псевдоспін-електронної взаємодії).

4. Оператор поляризованості для моделі Фалікова-Кімбала

Модель Фалікова-Кімбала є однією з найчастіше використовуваних і досліджуваних моделей у теорії сильно скорельованих електронних систем. Областю її переважного застосування є переходи метал-діелектрик та стани зі змінною валентністю. На протязі останніх років було виявлено, що ця модель описує крім цього переходи у стани з просторовою модуляцією густини, а також фазове розшарування [27, 28].

Модель ФК є аналітично точно розв'язуваною в границі безмежної вимірності простору у підході динамічного середнього поля (ДСП). У зв'язку з цим в рамках моделі були проведені недавно [20] за допомогою методу ДСП розрахунки ефективного перерізу КР, виходячи з представлення Шастрі і Шраймана [2] для оператора поляризованості, що відповідає формулі (40) даної роботи. Така схема дозволила розглянути окремо внески різного типу - резонансні, нерезонансні та змішані. При цьому виникала необхідність розрахунку багаточасових кореляційних функцій, які визначались шляхом переходу до мацубарівського частотного представлення (де відповідні корелятори розраховувалися точно в границі $d \rightarrow \infty$) за допомогою

процедури, яка вимагала узагальнення звичайної спектральної теореми для двочасових функцій Гріна.

Разом з тим, представляє інтерес розвиток і наближених схем розрахунку перерізу КР для моделі ФК. Ми зупинимось тут на підході, що відповідає наближенню сильного зв'язку і базується на згаданому вже розкладі за степенями переносу t_{ij} . Значимо, що використання такого розкладу дало можливість відтворити [24] (в другому порядку за t_{ij} у виразі для оператора поляризованості) результати, як зрештою і також сам механізм, для т.зв. двомагнотного розсіяння [1] у випадку моделі Хаббарда при половинному заповненні, коли в ній існує антиферромагнітне впорядкування.

Гамільтоніан моделі ФК запишемо в стандартному вигляді [29]

$$H = \sum_i (E_d d_i^+ d_i + E_f f_i^+ f_i) + U \sum_i d_i^+ d_i f_i^+ f_i + \sum_{ij} t_{ij} d_i^+ d_j \quad (41)$$

де індекси d і f відносяться, відповідно, до рухомих та нерухомих частинок (електронів). Енергії E_d і E_f відраховуються від своїх хімічних потенціалів. Доцільно перейти від фермі-операторів до операторів Хаббарда, ввівши базис одновузлових станів $|n_{id}, n_{if}\rangle$ (де n_{id}, n_{if} - числа заповнення рухомих та нерухомих частинок відповідно)

$$|i; 1\rangle = |i; 0, 0\rangle; \quad |i; 2\rangle = |1, 1\rangle; \quad |i; 3\rangle = |i; 0, 1\rangle; \quad |i; 4\rangle = |1, 0\rangle,$$

тоді

$$\begin{aligned} d_i^+ &= X_i^{41} + X_i^{23}; & f_i^+ &= X_i^{31} - X_i^{24} \\ d_i^+ d_i &= X_i^{44} + X_i^{22}; & f_i^+ f_i &= X_i^{33} + X_i^{22}. \end{aligned} \quad (42)$$

Гамільтоніан моделі ФК прийме вигляд

$$\begin{aligned} H &= \sum_i (E_d X_i^{44} + E_f X_i^{33} + (E_d + E_f + U) X_i^{22}) + \\ &\sum_{ij} t_{ij} (X_i^{41} + X_i^{23})(X_j^{14} + X_j^{32}). \end{aligned} \quad (43)$$

Введемо оператор електричного дипольного моменту, що відноситься до i -го вузла

$$M_i^\alpha = R_i^\alpha [e X_i^{44} + q X_i^{33} + (e + q) X_i^{22}] \quad (44)$$

де e і q - ефективні заряди рухомих та нерухомих частинок. В довгохвильовій границі ($\vec{q} \rightarrow 0$) $M^\alpha(\vec{q} = 0) = \sum_i M_i^\alpha$. При використанні

для оператора поляризованості його представлення через оператор $P^{\mu\nu}$, побудований на операторах фур'є-образів дипольних моментів, матимемо

$$\chi_{\mu\nu}(t) = -\frac{2\pi\omega_1}{V\omega_2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega'_1 e^{i(\omega_1 - \omega'_1)t} \{ \{ M_\mu(\vec{q}_s) | M_\nu(-\vec{q}_i) \} \}_{\omega'_1, \omega_1} \quad (45)$$

тут і в подальших розрахунках ми кладемо $\hbar = 1$. Неусереднена функція Гріна $\{ \{ M_\mu | M_\nu \} \}$ виражається через функції, побудовані на діагональних X -операаторах. Застосуємо схему отримання явних виразів для таких функцій, що ґрунтується на методі рівнянь руху (така схема була запропонована в [21]), обмежуючись в ланцюжку рівнянь членами не вище другого порядку за t_{ij} . Проілюструємо цей спосіб на прикладі функції $\{ \{ X_i^{44} | X_l^{44} \} \}_{\omega_1, \omega_2}$.

Початкове рівняння руху для $\{ \{ X^{44} | X^{44} \} \}$ має вигляд

$$\begin{aligned} \omega_1 \{ \{ X_i^{44} | X_l^{44} \} \}_{\omega_1 \omega_2} &= \sum_j t_{ij} \{ \{ X_i^{41} (X_j^{14} + X_j^{32}) | X_l^{44} \} \}_{\omega_1 \omega_2} - \\ &- \sum_j t_{jl} \{ \{ (X_j^{41} + X_j^{23}) X_i^{14} | X_l^{44} \} \}_{\omega_1 \omega_2}. \end{aligned} \quad (46)$$

Неусереднені функції вищого порядку, що входять в дане рівняння, можна шукати в лінійному наближенні за t_{ij} . Для першої з них після диференціювання по другому часовому аргументу маємо:

$$\begin{aligned} \omega_2 \{ \{ X_i^{41} (X_j^{14} + X_j^{32}) | X_l^{44} \} \}_{\omega_1 \omega_2} &= \\ \frac{ \{ \delta_{jl} X_i^{41} X_j^{14} - \delta_{il} X_i^{41} (X_j^{14} + X_j^{32}) \} }{2\pi} & \\ - \sum_m t_{lm} \{ \{ X_i^{41} (X_j^{14} + X_j^{32}) | X_l^{41} (X_m^{14} + X_m^{32}) \} \}_{\omega_1 \omega_2} &+ \\ \sum_m t_{ml} \{ \{ X_i^{41} (X_j^{14} + X_j^{32}) | (X_m^{41} + X_m^{23}) X_l^{14} \} \}_{\omega_1 \omega_2} & \end{aligned} \quad (47)$$

Останні дві функції в цьому виразі слід визначати в нульовому наближенні:

$$\begin{aligned} \{ \{ X_i^{41} (X_j^{14} + X_j^{32}) | X_l^{41} (X_m^{14} + X_m^{32}) \} \}_{\omega_1 \omega_2} &= \frac{1}{2\pi} \left(\frac{A_{ij}^{ml}}{\omega_1} + \frac{B_{ij}^{ml}}{\omega_1 - U} \right) \quad (48) \\ \{ \{ X_i^{41} (X_j^{14} + X_j^{32}) | (X_m^{41} + X_m^{23}) X_l^{14} \} \}_{\omega_1 \omega_2} &= \frac{1}{2\pi} \left(\frac{C_{ij}^{ml}}{\omega_1} + \frac{D_{ij}^{ml}}{\omega_1 - U} \right) \end{aligned}$$

де

$$\begin{aligned} A_{ij}^{ml} &= [X_i^{41} (X_j^{11} + X_j^{44}) (X_m^{14} + X_m^{32}) \delta_{jl} - \\ X_l^{41} (X_i^{11} + X_i^{44}) X_j^{14} \delta_{im}]_{\omega_1 - \omega_2} & \quad (49) \\ B_{ij}^{ml} &= -[X_l^{41} (X_m^{11} + X_m^{44}) X_j^{32} \delta_{im}]_{\omega_1 - \omega_2} \\ C_{ij}^{ml} &= [X_i^{41} (X_j^{11} + X_j^{44}) X_l^{14} \delta_{jm} - \\ (X_m^{41} + X_m^{23}) (X_i^{11} + X_i^{44}) X_j^{14} \delta_{il}]_{\omega_1 - \omega_2} & \\ D_{ij}^{ml} &= [X_i^{41} (X_j^{22} + X_j^{33}) X_l^{14} \delta_{jm} - \\ (X_m^{41} + X_m^{23}) (X_i^{11} + X_i^{44}) X_j^{32} \delta_{il}]_{\omega_1 - \omega_2}. & \end{aligned}$$

Аналогічним способом визначається друга функція вищого порядку $\{ \{ (X_j^{41} + X_j^{23}) X_i^{14} | X_l^{44} \} \}_{\omega_1 \omega_2}$ у формулі (46). В результаті отримується

$$\begin{aligned} \{ \{ X_i^{44} | X_l^{44} \} \}_{\omega_1 \omega_2} &= \frac{1}{2\pi\omega_1\omega_2} \sum_j t_{ij} \{ \delta_{jl} X_i^{41} X_j^{14} - \\ \delta_{il} X_i^{41} (X_j^{14} + X_j^{32}) \}_{\omega_1 - \omega_2} &- \\ \frac{1}{2\pi\omega_1\omega_2} \sum_j t_{ij} \sum_m t_{lm} \left(\frac{A_{ij}^{ml}}{\omega_1} + \frac{B_{ij}^{ml}}{\omega_1 - U} \right) &+ \\ \frac{1}{2\pi\omega_1\omega_2} \sum_j t_{ij} \sum_m t_{ml} \left(\frac{C_{ij}^{ml}}{\omega_1} + \frac{D_{ij}^{ml}}{\omega_1 - U} \right) &- \\ \frac{1}{2\pi\omega_1\omega_2} \sum_j t_{ij} (\delta_{il} (X_j^{41} + X_j^{23}) X_i^{14} - \delta_{jl} X_j^{41} X_i^{14})_{\omega_1 - \omega_2} &+ \\ \frac{1}{2\pi\omega_1\omega_2} \sum_j t_{ij} \sum_m t_{lm} \left(\frac{A_{ji}^{ml}}{\omega_1} + \frac{K_{ji}^{lm}}{\omega_1 + U} \right) &- \\ \frac{1}{2\pi\omega_1\omega_2} \sum_j t_{ij} \sum_m t_{ml} \left(\frac{C_{ji}^{ml}}{\omega_1} + \frac{L_{ji}^{ml}}{\omega_1 + U} \right) & \end{aligned} \quad (50)$$

тут

$$\begin{aligned} K_{ji}^{lm} &= [X_j^{23} (X_i^{11} + X_i^{44}) (X_m^{14} + X_m^{32}) \delta_{il} - \\ X_l^{41} (X_j^{22} + X_j^{33}) X_i^{14} \delta_{jm}]_{\omega_1 - \omega_2} & \quad (51) \\ L_{ji}^{ml} &= [X_j^{23} (X_i^{11} + X_i^{44}) X_l^{14} \delta_{im}]_{\omega_1 - \omega_2} \end{aligned}$$

Подібно проводиться розрахунок інших функцій виду $\{ \{ X_i^{pp} | X_l^{qq} \} \}$.

При цьому можна переконатися, що

$$\begin{aligned} \{ \{ (X_i^{22} + X_i^{33}) | X_l^{qq} \} \}_{\omega_1 - \omega_2} &= 0 \\ \{ \{ (X_i^{pp} | (X_l^{22} + X_l^{33})) \} \}_{\omega_1 - \omega_2} &= 0, \end{aligned} \quad (52)$$

тому

$$\begin{aligned} \{ \{ M_\mu(\vec{q}_2) | M_\nu(-\vec{q}_1) \} \}_{\omega_1, \omega_2} |_{\vec{q}_2 \rightarrow 0, \vec{q}_1 \rightarrow 0} &\equiv \{ \{ M_\mu | M_\nu \} \}_{\omega_1 \omega_2} = \\ e^2 \sum_{il} R_i^\mu R_l^\nu \{ \{ (X_i^{44} - X_i^{33}) | (X_l^{44} - X_l^{33}) \} \}_{\omega_1 \omega_2} & \end{aligned} \quad (53)$$

Остаточний результат розрахунку цієї функції зводиться до наступного вигляду (де виділено складові першого та другого порядків щодо t_{ij}):

$$\{ \{ M_\mu | M_\nu \} \}_{\omega_1 \omega_2} = \{ \{ M_\mu | M_\nu \} \}_{\omega_1 \omega_2}^{(1)} + \{ \{ M_\mu | M_\nu \} \}_{\omega_1 \omega_2}^{(2)}; \quad (54)$$

$$\begin{aligned} \{ \{ M_\mu | M_\nu \} \}_{\omega_1 \omega_2}^{(1)} &= \frac{e^2}{2\pi\omega_1\omega_2} \sum_{il} (R_i^\mu - R_l^\mu)(R_i^\nu - R_l^\nu) t_{il} \times \\ &\times [(X_i^{41} + X_i^{23})(X_l^{14} + X_l^{32})]_{\omega_1 - \omega_2} \\ \{ \{ M_\mu | M_\nu \} \}_{\omega_1 \omega_2}^{(2)} &= \frac{e^2}{2\pi\omega_1\omega_2} \sum_{ijl} t_{ij} t_{il} \{ (R_i^\mu - R_j^\mu)(R_i^\nu - R_l^\nu) \times \\ &\times \left[(X_i^{11} + X_i^{44})(X_l^{14} + X_l^{32}) \left(\frac{1}{\omega_1} X_j^{41} + \frac{1}{\omega_1 + U} X_j^{23} \right) + \right. \\ &(X_i^{22} + X_i^{33})(X_l^{14} + X_l^{32}) \left(\frac{1}{\omega_1} X_j^{23} + \frac{1}{\omega_1 - U} X_j^{41} \right) - \\ &(X_i^{11} + X_i^{44})(X_l^{41} + X_l^{23}) \left(\frac{1}{\omega_1} X_j^{14} + \frac{1}{\omega_1 - U} X_j^{32} \right) - \\ &\left. (X_i^{22} + X_i^{33})(X_l^{41} + X_l^{23}) \left(\frac{1}{\omega_1 + U} X_j^{14} + \frac{1}{\omega_1} X_j^{32} \right) \right]_{\omega_1 - \omega_2} \}. \end{aligned} \quad (55)$$

В отриманих виразах можна частково повернутися до фермі-операторів d_i, d_i^+ і f_i, f_i^+ . Ввівши позначення для числа заповнення нерухомих частинок $w_i \equiv n_{if} = f_i^+ f_i$, можемо переписати попередні

формули у вигляді:

$$\begin{aligned} \{ \{ M_\mu | M_\nu \} \}_{\omega_1 \omega_2}^{(1)} &= \frac{e^2}{2\pi\omega_1\omega_2} \sum_{il} (R_i^\mu - R_l^\mu)(R_i^\nu - R_l^\nu) t_{il} [d_i^+ d_l]_{\omega_1 - \omega_2} \\ \{ \{ M_\mu | M_\nu \} \}_{\omega_1 \omega_2}^{(2)} &= \frac{e^2}{2\pi\omega_1\omega_2} \sum_{ijl} t_{ij} t_{il} \{ (R_i^\mu - R_j^\mu)(R_i^\nu - R_l^\nu) \times \\ &[(1 - w_i) \left(\frac{1}{\omega_1} X_j^{41} + \frac{1}{\omega_1 + U} X_j^{23} \right) d_l \\ &+ w_i \left(\frac{1}{\omega_1 - U} X_j^{41} + \frac{1}{\omega_1} X_j^{23} \right) d_l]_{\omega_1 - \omega_2} \} + \\ &+ (R_i^\mu - R_j^\mu)(R_l^\nu - R_i^\nu) [(1 - w_i) d_l^+ \left(\frac{1}{\omega_1} X_j^{14} + \frac{1}{\omega_1 - U} X_j^{32} \right) + \\ &w_i d_l^+ \left(\frac{1}{\omega_1 + U} X_j^{14} + \frac{1}{\omega_1} X_j^{32} \right)]_{\omega_1 - \omega_2} \} \end{aligned} \quad (56)$$

Перепишемо член 1-го порядку через оператори, що діють на блохівські стани, застосувавши перетворення типу (28):

$$\{ \{ M_\mu | M_\nu \} \}_{\omega_1 \omega_2}^{(1)} = \frac{e^2}{2\pi\omega_1\omega_2} \sum_k \frac{\partial^2 t_k}{\partial k^\mu \partial k^\nu} [\alpha_k^+ \alpha_k]_{\omega_1 - \omega_2} \quad (57)$$

Як видно, цей доданок відповідає нерезонансній складовій тензора розсіяння (див. (40)). Тому можна зробити висновок, що в поправці другого порядку $\{ \{ M_\mu | M_\nu \} \}_{\omega_1 \omega_2}^{(2)}$ містяться внески найнижчого порядку за t від резонансної компоненти. У k -представленні

$$\begin{aligned} \{ \{ M_\mu | M_\nu \} \}_{\omega_1 \omega_2}^{(2)} &= -\frac{e^2}{2\pi\omega_1\omega_2} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k_1 k_2} \frac{\partial t_{k_1}}{\partial k_1^\mu} \frac{\partial t_{k_2}}{\partial k_2^\nu} \times \\ &\{ [(1 - w)_{k_1 + k_2} \left(\frac{1}{\omega_1} X_{-k_1}^{41} + \frac{1}{\omega_1 + U} X_{-k_1}^{23} \right) \alpha_{-k_2} + \\ &w_{k_1 + k_2} \left(\frac{1}{\omega_1 - U} X_{-k_1}^{41} + \frac{1}{\omega_1} X_{-k_1}^{23} \right) \alpha_{-k_2}]_{\omega_1 - \omega_2} - \\ &[(1 - w)_{k_1 + k_2} \alpha_{k_2}^+ \left(\frac{1}{\omega_1} X_{-k_1}^{14} + \frac{1}{\omega_1 - U} X_{-k_1}^{32} \right) + \\ &w_{k_1 + k_2} \alpha_{k_2}^+ \left(\frac{1}{\omega_1 + U} X_{-k_1}^{14} + \frac{1}{\omega_1} X_{-k_1}^{32} \right)]_{\omega_1 - \omega_2} \} \end{aligned} \quad (58)$$

Роль вершини тут відіграють похідні $\partial t_k / \partial k^\alpha \equiv \partial \epsilon_k / \partial k^\alpha$, які мають зміст матричних елементів оператора v_α швидкості електрона на блохівських станах.

Як було показано в роботі [20] при дослідженні резонансного комбінаційного розсіяння світла в моделі ФК, можливим є резонансне наростання інтенсивності розсіяння при частоті падаючого світла, близькій до величини енергії взаємодії U . Як видно з формули (58), у нашому підході в виразі для оператора поляризованості з'являються доданки, які теж приведуть до резонансного наростання інтенсивності при частоті світла, близькій до величини U . Звичайно, формула (58) відповідає розкладу за степенями t . Для більш детального аналізу резонансного розсіяння варто порівняти результати, які можна було б отримати цим шляхом, з даними розрахунків резонансних внесків до перерізу КР, які отримані для моделі ФК методом ДСП в границі $d \rightarrow \infty$ [20].

Зауважимо, що загальна структура отриманих поправок (у вигляді сум добутків функцій від частот $F(\omega_1, \omega_2)$ на оператори $Q(\omega_1 - \omega_2)$) зберігається і для членів вищого порядку за степенями t . В загальному можна записати

$$\{\{M_\mu | M_\nu\}\}_{\omega_1 \omega_2} = \sum_s F_s^{\mu\nu}(\omega_1, \omega_2) Q_s(\omega_1 - \omega_2) \quad (59)$$

Тензор розсіяння у даному випадку представиться у вигляді:

$$H^{\mu\nu, \alpha\beta}(\omega_1, \omega_2) = (2\pi)^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_s \sum_r F_s^{\mu\nu}(-\omega_2, -\omega_1) F_r^{\alpha\beta}(\omega'_2, \omega_1) \langle Q_s(-\omega_2 + \omega_1) Q_r(\omega'_2 - \omega_1) \rangle d\omega'_2 \quad (60)$$

Перейшовши до гейзенберзького представлення для операторів

$$\langle Q_s(-\omega_2 + \omega_1) Q_r(\omega'_2 - \omega_1) \rangle = \frac{1}{2\pi} \delta(\omega'_2 - \omega_2) \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i(\omega_1 - \omega_2)t} \langle Q_s(t) Q_r(0) \rangle \quad (61)$$

матимемо

$$H^{\mu\nu, \alpha\beta}(\omega_1, \omega_2) = 2\pi \sum_{sr} F_s^{\mu\nu}(-\omega_2, -\omega_1) F_r^{\alpha\beta}(\omega_2, \omega_1) \times \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i(\omega_1 - \omega_2)t} \langle Q_s(t) Q_r(0) \rangle. \quad (62)$$

Таким чином переріз КР розпадається в даному випадку на ряд парціальних внесків, пов'язаних з процесами розсіяння різних порядків за степенями параметра переносу t .

Слід підкреслити, що в рамках використаного підходу не з'являються багаточасові кореляційні функції і тому відсутні згадані вже проблеми, пов'язані з розрахунком їх фур'є-компонент у частотному просторі.

5. Оператор поляризованості для ПЕМ: випадок сильної псевдоспін-електронної взаємодії

ПЕМ з тунельним розщепленням рівнів є певним узагальненням моделі ФК для випадку, коли у системі присутні локально-ангармонічні елементи структури. Прикладами таких систем можуть бути високотемпературні надпровідники типу YBaCuO (локальні ангармонічні коливання апексного кисню у напрямку по нормалі до площини CuO₂) а також кристали з водневими зв'язками. Для опису таких коливань у випадку локального потенціалу з двома мінімумами застосовують псевдоспінний формалізм. В результаті гамільтоніан ПЕМ має вигляд:

$$H = \sum_i (U n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} - \mu(n_{i,\uparrow} + n_{i,\downarrow}) + g S_i^z (n_{i,\uparrow} + n_{i,\downarrow}) - h S_i^z - \Omega S_i^x) + \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} \quad (63)$$

Електронна підсистема у цій моделі описується гамільтоніаном Хаббарда (t_{ij} -доданок описує перескок електрона зі спіном σ з вузла i на вузол j , U -доданок - кулонівське відштовхування), g -доданок описує псевдоспін-електронну взаємодію, Ω -доданок - тунельне розщеплення рівнів, h -доданок - асиметрію локального ангармонічного потенціалу [30–32].

Гамільтоніан ПЕМ є подібним до гамільтоніану згадуваної вже моделі Фалікова-Кімбала. Між моделями, однак, існує суттєва відмінність, яка полягає в наступному. Модель ФК не містить доданку, який у ПЕМ відповідає за тунельне розщеплення рівнів (тобто ПЕМ враховує перескоки т. зв. нерухомих частинок з одного мінімуму локального двоямного потенціалу в інший); крім цього для моделі ФК як правило використовують режим постійної концентрації нерухомих частинок (це відповідає в ПЕМ фіксації середнього числа псевдоспіна), в той час як в ПЕМ використовують режими фіксації хімпотенціалу або фіксації концентрації рухомих частинок (електронів).

Дослідження ПЕМ були присвячені аналізу електронного спектру [33], вивченню поведінки діелектричної сприйнятливості, ви-

явленню фазових переходів та виникненню фазового розшарування [34–38]. У роботі [35] для ПЕМ із прямою взаємодією між псевдоспінами при $\Omega = 0, t = 0$ було встановлено можливість фазового переходу першого роду між однорідними фазами а також можливість фазового розшарування. Схожі результати було отримано для випадку $\Omega = 0, t \neq 0$ при великому g у границі $U \rightarrow \infty$ для дво-підграткової ПЕМ [36] та у випадку $U = 0$ [37]. У роботі [37] на основі термодинамічно узгодженої схеми узагальненого наближення хаотичних фаз (УНХФ) було виявлено можливість появи фази з подвійною модуляцією періоду ґратки для випадку $U = 0, \Omega = 0$. При слабкій псевдоспін-електронній взаємодії при $\Omega \neq 0$ у рамках наближень середнього поля та хаотичних фаз було встановлено можливість появи у системі зарядовпорядкованої та надпровідної фази [38, 39]. Було виявлено, що в залежності від значення хімпотенціалу система може перейти у фазу з подвійною модуляцією періоду ґратки (хімпотенціал розташований поблизу центру зони), у однорідну фазу (хімпотенціал поблизу країв зони) та у фазу з неспівмірною модуляцією періоду ґратки (при проміжних значеннях хімпотенціалу). При відмінному від нуля тунельному розщепленню рівнів та при неповинному заповненні система переходить у надпровідний стан.

Як вже було згадано у вступі, у роботі [21] було досліджено ангармонічні фононі (псевдоспінові) внески у комбінаційне розсіяння світла для псевдоспін-електронної моделі для випадку сильного псевдоспін-електронного зв'язку при врахуванні лише псевдоспінового внеску в розсіяння. Було виділено складові розсіяння, пов'язані зі збудженням псевдоспін-хвильового типу а також із перебудовою електронного спектру при реорієнтації псевдоспінів. Базуючись на цій роботі, у даному дослідженні ми врахуємо також електронні внески в розсіяння та проаналізуємо випадки різних поляризацій падаючого та розсіяного світла.

Введемо базис одночастинкових станів: $|i; R\rangle \equiv |n_{i\uparrow}, n_{i\downarrow}, S_i^z = \frac{1}{2}\rangle$, $|i; \tilde{R}\rangle \equiv |n_{i\uparrow}, n_{i\downarrow}, S_i^z = -\frac{1}{2}\rangle$ [34]

$$\begin{aligned} |i; 1, \tilde{1}\rangle &= |i; 0, 0, \pm\frac{1}{2}\rangle, & |i; 2, \tilde{2}\rangle &= |i; 1, 1, \pm\frac{1}{2}\rangle, \\ |i; 3, \tilde{3}\rangle &= |i; 0, 1, \pm\frac{1}{2}\rangle, & |i; 4, \tilde{4}\rangle &= |i; 1, 0, \pm\frac{1}{2}\rangle. \end{aligned} \quad (64)$$

За допомогою перетворення

$$\begin{aligned} |i, R\rangle &= \cos\phi_r|i, r\rangle + \sin\phi_r|i, \tilde{r}\rangle \\ |i, \tilde{R}\rangle &= \cos\phi_r|i, \tilde{r}\rangle - \sin\phi_r|i, r\rangle, \\ \cos 2\phi_r &= \frac{n_r g - h}{\sqrt{(n_r g - h)^2 + \Omega^2}}, \end{aligned} \quad (65)$$

здiагоналізуємо одновузлову частину гамільтоніану

$$H_0 = \sum_{i,r} \lambda_r X_i^{rr} + \sum_{i,\tilde{r}} \lambda_{\tilde{r}} X_i^{\tilde{r}\tilde{r}} \quad (66)$$

$$\lambda_{r,\tilde{r}} = n_r \mu + U \delta_{r,2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{(n_r g - h)^2 + \Omega^2}. \quad (67)$$

Дипольний момент комірки запишеться у вигляді

$$M_i^\alpha = e R_i^\alpha (n_{\uparrow,i} + n_{\downarrow,i}) + d_s S_i^z \delta_{\alpha z}, \quad (68)$$

ми враховуємо електронні внески (перший доданок у виразі (68)) та псевдоспінові (другий доданок) в дипольний момент [21, 24]. Також при записі виразу для дипольного моменту ми врахували, що локально ангармонічний потенціал орієнтований вздовж осі z (для випадку кристалу типу YBaCuO це напрямок ангармонічних коливань апексного кисню O4, вісь z перпендикулярна до площин CuO₂).

Вираз для оператора поляризованості шукатимемо за допомогою методу рівнянь руху, здійснюючи розклад за степенями параметра

електронного переносу. В результаті отримуємо ([24]):

$$\begin{aligned}
\{\{M_k^\alpha | M_l^\beta\}\} &= \frac{\delta_{k,l} \delta_{\alpha,z} \delta_{\alpha\beta} d_s^2}{8\pi\omega_1} \sum_r \sin(4\phi_r) (X_k^{r\tilde{r}} - X_k^{\tilde{r}r}) + \quad (69) \\
&+ \sum_r \frac{\delta_{k,l} \delta_{\alpha,z} \delta_{\alpha\beta} d_s^2}{8\pi(\omega_1 - \lambda_r + \lambda_{\tilde{r}})} (\sin(4\phi_r) X_k^{r\tilde{r}} - \sin^2(2\phi_r) (X_k^{rr} - X_k^{\tilde{r}\tilde{r}})) - \\
&- \sum_r \frac{\delta_{k,l} \delta_{\alpha,z} \delta_{\alpha\beta} d_s^2}{8\pi(\omega_1 + \lambda_r - \lambda_{\tilde{r}})} (\sin(4\phi_r) X_k^{r\tilde{r}} - \sin^2(2\phi_r) (X_k^{rr} - X_k^{\tilde{r}\tilde{r}})) + \\
&+ \frac{eR_k^\alpha}{\omega_1} \sum_{i,j,\sigma} t_{i,j} (\delta_{i,k} - \delta_{j,k}) \{\{a_{i,\sigma}^\dagger a_{j,\sigma} | M_l^\beta\}\} + \\
&+ \sum_r \frac{d_s \delta_{\alpha,z}}{2\omega_1} \sum_{i,j,\sigma} t_{i,j} \cos(2\phi_r) \{\{[X_k^{rr} - X_k^{\tilde{r}\tilde{r}}, a_{i,\sigma}^\dagger a_{j,\sigma}] | M_l^\beta\}\} + \\
&+ \sum_r \frac{d_s \delta_{\alpha,z}}{2(\omega_1 - \lambda_r + \lambda_{\tilde{r}})} \sum_{i,j,\sigma} t_{i,j} \sin(2\phi_r) \{\{[X_k^{r\tilde{r}}, a_{i,\sigma}^\dagger a_{j,\sigma}] | M_l^\beta\}\} + \\
&+ \sum_r \frac{d_s \delta_{\alpha,z}}{2(\omega_1 + \lambda_r - \lambda_{\tilde{r}})} \sum_{i,j,\sigma} t_{i,j} \sin(2\phi_r) \{\{[X_k^{\tilde{r}r}, a_{i,\sigma}^\dagger a_{j,\sigma}] | M_l^\beta\}\}.
\end{aligned}$$

Перші три рядки (нульовий порядок по параметру переносу t) в виразі (69) пов'язані із чисто псевдоспіновими внесками, вони дадуть вклад в розсіяння для випадку zz поляризації. Доданок в четвертому рядку містить внески, один з яких пов'язаний з чисто електронними внесками в дипольний момент (коли замість M_l^β підставити електронну складову дипольного моменту (68)). Якщо ж в доданку четвертого рядку замість M_l^β підставити псевдоспінову складову дипольного моменту, то ми отримуємо змішаний псевдоспін-електронний внесок в оператор поляризованості. Доданки п'ятого-сьомого рядків дадуть або чисто псевдоспіновий внесок в оператор поляризованості, або змішаний псевдоспін-електронний.

Розглянемо більш детально чисто електронну складову розсіяння (що походить, як вже було зазначено, від четвертого рядка в формулі

(69)). Для електронних внесків до КР отримуємо наступне

$$\begin{aligned}
\{\{M_k^\alpha | M_l^\beta\}\}^{el} &= \frac{e^2}{\omega_1} \sum_{i,j,\sigma} R_k^\alpha R_l^\beta t_{i,j} (\delta_{i,k} - \delta_{j,k}) \{\{a_{i,\sigma}^+ a_{j,\sigma} | (n_{\uparrow l} + n_{\downarrow l})\}\} = \\
&\frac{e^2}{\omega_1 \omega_2} R_k^\alpha R_l^\beta \sum_{\substack{i,j,\sigma \\ s,p,\sigma'}} t_{i,j} (\delta_{i,k} - \delta_{j,k}) t_{s,p} (\delta_{p,l} - \delta_{s,l}) \{\{a_{i,\sigma}^+ a_{j,\sigma} | a_{s,\sigma'}^+ a_{p,\sigma'}\}\} \\
&- \frac{e^2}{2\pi\omega_1 \omega_2} R_k^\alpha R_l^\beta \sum_{i,j,\sigma} t_{i,j} (\delta_{i,k} - \delta_{j,k}) (\delta_{i,l} - \delta_{j,l}) a_{i,\sigma}^+ a_{j,\sigma}. \quad (70)
\end{aligned}$$

Як вже було зазначено, ми розглядаємо довгохвильову границю, хвильові вектори падаючого та розсіяного світла $\vec{k}_1, \vec{k}_2 \approx 0$, тому можемо просумувати по індексах k, l . При обмеженні лінійним доданком

$$\begin{aligned}
\{\{M_k^\alpha | M_l^\beta\}\}^{el} &= - \sum_{k,l,i,j,\sigma} \frac{e^2 R_k^\alpha R_l^\beta}{2\pi\omega_1 \omega_2} t_{i,j} (\delta_{i,k} - \delta_{j,k}) (\delta_{i,l} - \delta_{j,l}) a_{i,\sigma}^+ a_{j,\sigma} = \\
&\frac{e^2}{2\pi\omega_1 \omega_2} \sum_k \frac{\partial^2 t(k)}{\partial k_\alpha \partial k_\beta} \alpha_k^+ \alpha_k, \quad (71) \\
\alpha_k &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i a_i e^{-ikR_i}, \quad t_k = \sum_R t(R) e^{-ikR}.
\end{aligned}$$

Фактично, вираз (71) є аналогічним до нерезонансного доданку в формулі (40).

Тензор КР виражається через двочасові функції Гріна (що впливає з формули (26)):

$$\begin{aligned}
H_{k_2, k_1=0}^{\alpha\beta, \alpha'\beta'}(\omega_1, \omega_2) &= \frac{-(2\pi)^2}{(e^{\beta\omega} - 1)} \times \quad (72) \\
&\sum_{i,i_1,j,j_1} 2\Im \langle \langle \{\{M_i^\alpha | M_j^\beta\}\}_{\omega_2, \omega_1} | \{\{M_{i_1}^{\alpha'} | M_{j_1}^{\beta'}\}\}_{-\omega_2, -\omega_1} \rangle \rangle_{\omega+i\varepsilon}, \\
\omega &= \omega_2 - \omega_1
\end{aligned}$$

6. Корелятори в УНХФ

Як видно з формули (72), для знаходження тензора розсіяння необхідно розрахувати двочасові функції Гріна, побудовані на операторах поляризованості. Використавши співвідношення, що пов'язує двочасові функції Гріна з температурними функціями Гріна

$$\langle \langle A|B \rangle \rangle(\omega) = \langle TA(\tau)B \rangle(i\omega \rightarrow \omega), \quad (73)$$

де $\langle TA(\tau)B \rangle(i\omega)$ - температурна функція Гріна в частотному представленні, ми зведемо задачу до пошуку температурних функцій Гріна, для яких розроблений та добре відомий апарат діаграмної техніки.

Як і в роботі [21], ми розглядаємо КР для випадку, коли частота $\omega_2 - \omega_1$ знаходиться поблизу $\omega' = \lambda_1 - \lambda_1$, це відповідає стоксовій компоненті розсіяння. Розіб'ємо вихідний гамільтоніан на дві частини, гамільтоніан нульового наближення та збурення,

$$\begin{aligned} H &= H_0 + H_{int}, \\ H_{int} &= \sum_{i,j,\sigma} t_{i,j} a_{i,\sigma}^\dagger a_{j,\sigma}. \end{aligned} \quad (74)$$

Розглядатимемо два випадки поляризації світла: 1) у напрямку zz (перпендикулярному до площин CuO) 2) у напрямку $xx + yy$ (паралельно до площин). Як видно з виразу (69) (перші три рядки), у найнижчому (нульовому) порядку по параметру електронного переносу t_{ij} для випадку zz поляризації щоб отримати вираз для тензора $H(\omega_1, \omega_2)$, необхідно знайти функцію Гріна, побудовану на операторах $X^{\tilde{r}\tilde{r}}, X^{\tilde{r}r}, X^{\tilde{r}\tilde{r}}, X^{rr}$

$$\begin{aligned} \langle TX_l^{pq}(\tau) X_m^{rs} \rangle &= K_{lm}^{pqrs}(\tau) \\ \int_0^\beta d(\tau) e^{i\omega_n \tau} \frac{1}{N} \sum_{lm} K_{lm}^{pqrs}(\tau) e^{iq(R_l - R_m)} &= K^{pqrs}(q, \omega_n). \end{aligned} \quad (75)$$

Для випадку $xx + yy$ поляризації вклад у розсіяння дають доданки в операторі поляризованості першого і вищих порядків по переносу. Обмежуючись знову найнижчим (першим в даному випадку - четвертий рядок у формулі (69)) порядком, для $xx + yy$ поляризації треба шукати функцію Гріна

$$\begin{aligned} \langle T \sum_k \gamma_k \alpha_k^+(\tau) \alpha_k(\tau) \sum_{k'} \gamma_{k'} \alpha_{k'}^+ \alpha_{k'} \rangle, \\ \gamma_k = \sum_\alpha \frac{\partial^2 t_k}{\partial k_\alpha^2} = -a^2 t_k, \end{aligned} \quad (76)$$

a є постійною квадратної ґратки. Введемо позначення для незбуреної функції Гріна:

$$g^{pq}(\tau - \tau') = \delta_{ij} g^{pq}(\tau - \tau') = \delta_{ij} \frac{\langle TX^{pq}(\tau) X^{rs}(\tau') \rangle}{\langle [X^{rs}, X^{pq}]_{\pm} \rangle_0}, \quad (77)$$

$$g^{pq}(\omega_n) = \int_0^\beta d(\tau - \tau') e^{-i\omega_n(\tau - \tau')} g^{pq}(\tau - \tau') = \pm \frac{1}{i\omega_n - \lambda_{pq}}, \quad (78)$$

тут $\lambda_{pq} = \lambda_p - \lambda_q$; верхній (нижній) знак відповідає функції Гріна, побудованій на фермі (бозе) оператора, при цьому $\omega_n = \frac{2n+1}{\beta} \pi$ та $\omega_n = \frac{2n}{\beta} \pi$ відповідно.

Використаємо такі діаграмні позначення [40]: трикутник \triangleleft_{pq} позначає функцію Гріна g^{pq} ; коло \triangleleft_{pq} та \textcircled{pq} позначає середні $\langle X^{pp} \pm X^{qq} \rangle_0$ та $\langle X^{pp} \rangle_0$ відповідно; хвиляста лінія \sim є електронним переносом. Функція Гріна в наближенні Хаббард-I

$$G^{pq} = \triangleleft_{pq} = \triangleleft_{pq} + \triangleleft_{pq} \sim \triangleleft_{pq} + \triangleleft_{pq} \sim \triangleleft_{pq} \sim \triangleleft_{pq} + \dots,$$

в аналітичній формі

$$G^{pq} = \frac{1}{i\omega_n - \epsilon_{pq}(k)}, \quad \epsilon_{pq}(k) = \lambda_{pq} + A_{pq} \langle X^{pp} + X^{qq} \rangle t_k, \quad (79)$$

коефіцієнти A_{pq} з'явилися в зв'язку з перетворенням (65), зокрема $A_{\tilde{4}\tilde{1}} = \cos^2 \phi_1$, $A_{\tilde{4}\tilde{1}} = \sin^2 \phi_1$.

Розглядатимемо випадок сильного зв'язку $U, g \gg \sqrt{h^2 + \Omega^2} > W$ ($W = \sum_j t_{ij}$). У цьому випадку ми приймаємо до уваги лише стани $|1\rangle$, $|\tilde{1}\rangle$, $|\tilde{3}\rangle$ та $|\tilde{4}\rangle$, які завдяки електронному переносу формують дві найнижчі електронні підзони $\lambda_{\tilde{4}\tilde{1}} = \lambda_{\tilde{3}\tilde{1}}$, $\lambda_{\tilde{4}\tilde{1}} = \lambda_{\tilde{3}\tilde{1}}$, розділені між собою [21].

Корелятори розраховуватимемо на основі теорії збурень, при цьому середні від Γ - добутоків операторів Хаббарда шукаємо за допомогою теореми Віка для операторів Хаббарда [40]. При підсумовуванні діаграм ми приймаємо до уваги ті діаграми, що мають ланцюжкову структуру [21], це відповідає узагальненому наближенню хаотичних фаз (УНХФ). У роботі [21] було показано, що найбільший внесок в частотному діапазоні $\omega \sim \omega'$ походить від корелятора $\langle TX^{\tilde{1}\tilde{1}}(\tau) X^{\tilde{1}\tilde{1}} \rangle$, у діаграмному вигляді для цього корелятора можемо записати (див. [21])

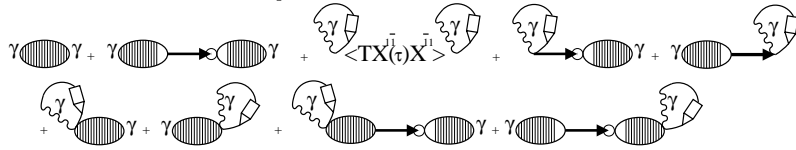
$$\langle TX^{\tilde{1}\tilde{1}}(\tau) X^{\tilde{1}\tilde{1}} \rangle = \rightarrow \circ + \textcircled{\text{---}} + \textcircled{\text{---}} \rightarrow + \rightarrow \circ \textcircled{\text{---}} + \textcircled{\text{---}} \rightarrow \textcircled{\text{---}}$$

де для бозонної функції Гріна G можна записати рівняння Дайсона:

$$G = \rightarrow = \rightarrow + \rightarrow (\textcircled{\text{---}} + \textcircled{\text{---}}) \rightarrow;$$

тонкою лінією зі стрілкою позначено незбурену функцію Гріна $g^{\tilde{1}\tilde{1}}$.

Подібним чином для $\langle T \sum_k \gamma_k \alpha_k^+(\tau) \alpha_k(\tau) \sum_q \gamma_q \alpha_q^+(\tau) \alpha_q \rangle$ отримуємо наступний діаграмний ряд

$$\frac{1}{N} \langle T \sum_k \gamma_k \alpha_k^+ \alpha_k(\tau) \sum_q \gamma_q \alpha_q^+ \alpha_q \rangle =$$


Заштриховані еліпси позначають багатопетлеві діаграми, що складаються з добутків однопетлевих діаграм :

$a = \text{штрихований еліпс}; b = \text{нештрихований еліпс}; c = \text{штрихований еліпс}; d = \text{нештрихований еліпс}; \gamma b = \text{штрихований еліпс з петлею}$ та подібні позначення для петель $b^\gamma, \gamma c, d^\gamma, \gamma b^\gamma$.

З роботи [21] випливає, що серед однопетлевих діаграм найбільш суттєвими є діаграми

$$a = \text{штрихований еліпс з петлею}, p = 4, 3 \text{ та подібні їм для петель } b, c, d, b^\gamma, \gamma c, d^\gamma, \gamma b^\gamma$$

(тобто з "нижньою" функцією Гріна $\mathcal{G}^{\tilde{4}\tilde{1}}$ або $\mathcal{G}^{\tilde{3}\tilde{1}}$ та з "верхньою" $\mathcal{G}^{\tilde{4}\tilde{1}}$ або $\mathcal{G}^{\tilde{3}\tilde{1}}$). В аналітичній формі

$$\begin{aligned} a &= \frac{-2 \sin^2 \phi_1 \cos^2 \phi_1}{N} \sum_k t_k t_k \frac{n(\epsilon_{\tilde{4}\tilde{1}}(k)) - n(\epsilon_{\tilde{4}\tilde{1}}(k))}{i\omega_n + \epsilon_{\tilde{4}\tilde{1}}(k) - \epsilon_{\tilde{4}\tilde{1}}(k)} \\ b &= \frac{-2}{N} \sum_k \frac{n(\epsilon_{\tilde{4}\tilde{1}}(k)) - n(\epsilon_{\tilde{4}\tilde{1}}(k))}{i\omega_n + \epsilon_{\tilde{4}\tilde{1}}(k) - \epsilon_{\tilde{4}\tilde{1}}(k)} + 2 \frac{n(\lambda_{\tilde{4}\tilde{1}}) - n(\lambda_{\tilde{4}\tilde{1}})}{i\omega_n + \lambda_{\tilde{4}\tilde{1}} - \lambda_{\tilde{4}\tilde{1}}} \quad (80) \\ c &= \frac{-2 \sin^2 \phi_1}{N} \sum_k t_k \frac{n(\epsilon_{\tilde{4}\tilde{1}}(k)) - n(\epsilon_{\tilde{4}\tilde{1}}(k))}{i\omega_n + \epsilon_{\tilde{4}\tilde{1}}(k) - \epsilon_{\tilde{4}\tilde{1}}(k)} \\ d &= \frac{-2 \cos^2 \phi_1}{N} \sum_k t_k \frac{n(\epsilon_{\tilde{4}\tilde{1}}(k)) - n(\epsilon_{\tilde{4}\tilde{1}}(k))}{i\omega_n + \epsilon_{\tilde{4}\tilde{1}}(k) - \epsilon_{\tilde{4}\tilde{1}}(k)} \end{aligned}$$

Петлі з позначкою γ $\gamma b, b^\gamma, \gamma c, d^\gamma, \gamma b^\gamma$ відрізняються від a, b, c, d тим, що в них під сумою по хвильовому вектору присутній додатково множник $\langle X^{11} + X^{\tilde{4}\tilde{4}} \rangle \gamma_k \cos \phi_1 \sin \phi_1$ для випадку, коли γ знаходиться зліва та $\langle X^{\tilde{1}\tilde{1}} + X^{\tilde{4}\tilde{4}} \rangle \gamma_k \cos \phi_1 \sin \phi_1$ коли γ справа.

Введемо позначення для багатопетлевих внесків

$$A = \text{штрихований еліпс}, B = \text{штрихований еліпс}, C = \text{штрихований еліпс}, D = \text{штрихований еліпс}, \gamma B = \text{штрихований еліпс з петлею}$$

та аналогічно для $\gamma B^\gamma, B^\gamma, \gamma C, D^\gamma$. Для них отримуємо наступні

рівняння

$$\begin{cases} A = a + aC + dA; \\ C = c + cC + bA \end{cases}$$

$$\begin{cases} B = b + cB + bD; \\ D = d + dD + aB \end{cases}$$

$$\begin{cases} B^\gamma = b^\gamma + cB^\gamma + bD^\gamma; \\ D^\gamma = d^\gamma + dD^\gamma + aB^\gamma \end{cases}$$

$$\gamma B^\gamma = \gamma b^\gamma + \gamma cB^\gamma + \gamma bD^\gamma \quad (81)$$

$$\gamma C = \gamma c + \gamma cC + \gamma bA$$

$$\gamma B = \gamma b + \gamma cB + \gamma bD$$

Розв'язавши ці рівняння, знайдемо вирази для багатопетлевих внесків. В результаті для бозонної функції Гріна отримується вираз

$$G = \frac{\langle X^{\tilde{1}\tilde{1}} - X^{11} \rangle}{i\omega_n + \lambda_1 - \lambda_{\tilde{1}} + \Delta - A \langle X^{\tilde{1}\tilde{1}} - X^{11} \rangle} \quad (82)$$

$$\Delta = \frac{2}{N} \sum_k t_k [n(\epsilon_{\tilde{4}\tilde{1}}) \sin^2 \phi_1 - n(\epsilon_{\tilde{4}\tilde{1}}) \cos^2 \phi_1] \quad (83)$$

Перший доданок у власноенергетичній частині функції G веде до перенормування енергетичних рівнів [36]. Для повного самоузгодження таке перенормування треба б було враховувати також у виразах для фермі-функцій Гріна. В числових розрахунках ми не приймаємо до уваги перенормування енергетичних рівнів у виразі для фермі-функцій Гріна та у виразі для бозонної функції Гріна (82). Для функції Гріна $\langle T X^{\tilde{1}\tilde{1}}(\tau) X^{\tilde{1}\tilde{1}} \rangle$ було отримано в аналітичній формі [21]

$$\langle T X^{\tilde{1}\tilde{1}}(\tau) X^{\tilde{1}\tilde{1}} \rangle_{q=0} = G + B + DG + GC + GDC \quad (84)$$

Подібно для $\langle T \sum_k \gamma_k \alpha_k^+(\tau) \alpha_k(\tau) \sum_q \gamma_q \alpha_q^+(\tau) \alpha_q \rangle$ матимемо

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \langle T \sum_k \gamma_k \alpha_k^+(\tau) \alpha_k(\tau) \sum_q \gamma_q \alpha_q^+(\tau) \alpha_q \rangle &= \gamma B^\gamma + \gamma CGD^\gamma + \quad (85) \\ &+ \Delta_{\tilde{4}\tilde{1}} \langle X^{\tilde{1}\tilde{1}} X^{\tilde{1}\tilde{1}} \rangle \Delta_{\tilde{4}\tilde{1}} + \Delta_{\tilde{4}\tilde{1}} \gamma CG + \Delta_{\tilde{4}\tilde{1}} D^\gamma G + \gamma B \Delta_{\tilde{4}\tilde{1}} + \\ &B^\gamma \Delta_{\tilde{4}\tilde{1}} + CGD^\gamma \Delta_{\tilde{4}\tilde{1}} + \gamma CDG \Delta_{\tilde{4}\tilde{1}} \end{aligned}$$

де

$$\Delta_{rq} = -2 \sum_k t_k n(\epsilon_{rq}) \cos \phi_1 \sin \phi_1 \quad (86)$$

Перехід до двочасових функцій Гріна (які фігурують в виразі(72)) здійснюється за допомогою співвідношення (73). В результаті тензор розсіяння для випадків zz та $xx + yy$ поляризації має вигляд

$$H_{k_2, k_1=0}^{zz, zz}(\omega_1, \omega_2) = \frac{2\omega'^2 \sin^2 4\phi_1 (\frac{d_s}{2})^4 N \Im \langle \langle X^{\tilde{1}\tilde{1}} | X^{\tilde{1}\tilde{1}} \rangle \rangle_{q=0}}{1 - e^{\beta\omega} \omega_2^2 (\omega_2 - \omega')^2} \quad (87)$$

$$H_{k_2, k_1=0}^{xx+yy, xx+yy}(\omega_1, \omega_2) = \frac{2(ea)^4 \Im \langle \langle \sum_k \gamma_k \alpha_k^+ \alpha_k | \sum_q \gamma_q \alpha_q^+ \alpha_q \rangle \rangle}{1 - e^{\beta\omega} \omega_1^2 \omega_2^2}$$

Для розрахунків нам ще потрібний зв'язок між хімічним потенціалом та електронною концентрацією. Для випадку незалежних підзон $\epsilon_{\tilde{4}\tilde{1}}$ та $\epsilon_{\tilde{4}\tilde{1}}$ отримується

$$\mu = \lambda_{\tilde{4}\tilde{1}} - \lambda_{\tilde{1}\tilde{1}} - W \cos^2 \phi_1 (1 - \frac{3}{2}n). \quad (88)$$

В наших числових розрахунках ми приймаємо, що дипольний момент псевдоспінів d_s є меншим ніж "дипольний момент" електронів ea (тут a - стала ґратки), така ситуація є типовою для ВТНП типу YBaCuO; в розрахунках ми беремо $d_s/ea = 0.6$.

З виразу (82) видно, що уявна частина петлевих внесків відмінна від нуля лише в частотному інтервалі

$$-W \frac{1 - \frac{3}{2}n}{1 - \frac{n}{2}} < -\frac{\omega}{\cos^2 \phi_1 - \frac{n}{2}} < W. \quad (89)$$

Уявна частина бозонної функції Гріна G може мати дельта-пік за межами цього інтервалу, оскільки дійсна частина знаменника в виразі для G може бути в цьому випадку рівною нулеві [21]. Варто відзначити, що знаменники у багатопетлевих внесках теж можуть обертатися в нуль зовні інтервалу (89), однак тоді δ -подібні внески взаємокомпенсуються.

На рис. 1-4 показано інтенсивність КР світла $I(\omega) \sim H(\omega)$ для zz та $xx + yy$ поляризацій. Видно, що при $T = 0$ (Рис.1,3) в спектрі присутні дві компоненти: 1) досить широка зона $\delta\omega = |\cos^2 \phi_1 - n/2| \frac{4(1-n)}{2-n} W$ 2) вузький дельта-пік (проявляється при високих електронних концентраціях - Рис.1, при малих електронних концентраціях він перекривається згаданою зоною - Рис.3). Перша з цих компонент є некогерентною і пов'язана з міжзонними переходами із зайнятих станів підзони $\lambda_{\tilde{4}\tilde{1}}$ до незайнятих станів підзони $\lambda_{\tilde{1}\tilde{1}}$ (схематично залежність положення країв зон та хімічного потенціалу від електронної концентрації зображено на рис.5 [21]), при цьому відбувається

перебудова електронних станів при перевороті псевдоспіна. Друга компонента є когерентною і має псевдоспінове походження (як вже було згадано, уявна частина функції G має дельта-пік). Вона пов'язана з колективною динамікою псевдоспінів, при цьому ефективна взаємодія між псевдоспінами формується завдяки зонним електронам.

На рис. 2,4 показано інтенсивність КР при $T \neq 0$. Некогерентна компонента тепер є ширшою $\delta\omega = |\cos^2 \phi_1 - n/2| 2W$, оскільки тепер є можливими міжзонні переходи між станами з довільними енергіями завдяки розмиванню Фермі-розподілів $n(\lambda_{\tilde{4}\tilde{1}})$ та $n(\lambda_{\tilde{4}\tilde{1}})$. Завдяки такому розширенню некогерентна частина покриває дельта-пік як для малих так і для великих значень електронної концентрації (рис. 2,4). Пік в спектрі пов'язаний в основному з особливостями поведінки уявної частини функції G , хоча внесок також дають також і уявні частини багатопетлевих діаграм.

При високих температурах спектр КР, розрахований в УНХФ є схожим на спектр, який може бути отриманим в однопетлевою наближенні (тоді $\Im \langle \langle X^{\tilde{1}\tilde{1}} | X^{\tilde{1}\tilde{1}} \rangle \rangle \sim \Im b$ та $\Im \langle \langle \sum_k \gamma_k a_k^+ a_k | \sum_q \gamma_q a_q^+ a_q \rangle \rangle \sim \Im a$, де b та a є однопетлевыми внесками) хоча центральний пік (при $\omega - \omega' \sim 0$) не відтворюється в цьому наближенні для $xx + yy$ поляризації (оскільки $\Im b \sim \rho(t^*) \delta n$, $\Im a \sim t^{*2} \rho(t^*) \delta n$, де $\rho(t)$ є густиною електронних станів, $\delta n = n(\epsilon_{\tilde{4}\tilde{1}}(t^*)) - n(\epsilon_{\tilde{4}\tilde{1}}(t^*))$, $t^* = \frac{\omega - \omega'}{n/2 - \cos^2 \phi_1}$ і тоді $\Im a(\omega \approx \omega') \approx 0$).

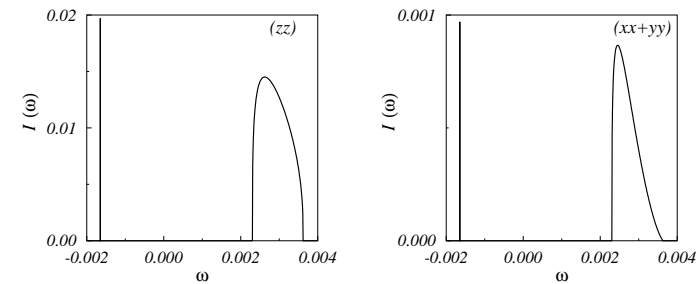


Рис. 1. Інтенсивність комбінаційного розсіяння для випадку zz та $xx + yy$ поляризації при $T = 0, W = 0.1, n = 0.9, h = 0.07, \Omega = 0.4$. Вертикальна лінія позначає положення дельта-піку. Інтенсивність вимірюється в довільних одиницях. Частота є зсунутою: $\omega = \omega_2 - \omega_1 - \omega'$.

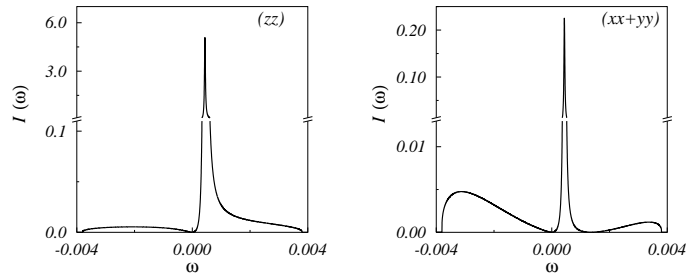


Рис. 2. Інтенсивність комбінаційного розсіяння для випадку zz та $xx + yy$ поляризації при $T = 0.08$, $W = 0.1$, $n = 0.9$, $h = 0.07$, $\Omega = 0.4$.

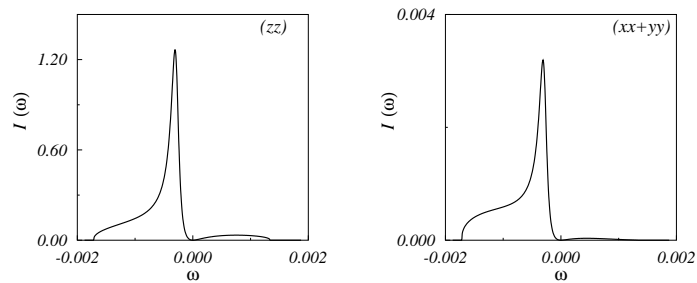


Рис. 3. Інтенсивність комбінаційного розсіяння для випадку zz та $xx + yy$ поляризації при $T = 0$, $W = 0.1$, $n = 0.2$, $h = 0.25$, $\Omega = 0.21$.

Слід відзначити відмінність між дослідженими нами псевдоспіновими внесками в розсіяння та звичайними фононними внесками. В нашому випадку розсіяння пов'язане із присутністю двоїмого асиметричного потенціалу та псевдоспіновими внесками в дипольний момент, в той час як в стандартному підході до фононного розсіяння розглядають, як правило, гармонічні коливання іонів і внесок в розсіяння формується лише за рахунок електронної поляризованості. Псевдоспіновий внесок в розсіяння буде існувати навіть при відсутності електронів, коли зміни загальної поляризованості формуються локальними ангармонізмами ґратки. Тоді в спектрі присутній δ - пік на частоті $\sqrt{h^2 + \Omega^2}$ [21]. Аналогом звичайного фононного КР у нашому випадку були б змішані псевдоспін-електронні внески, що виникають за рахунок взаємодії.

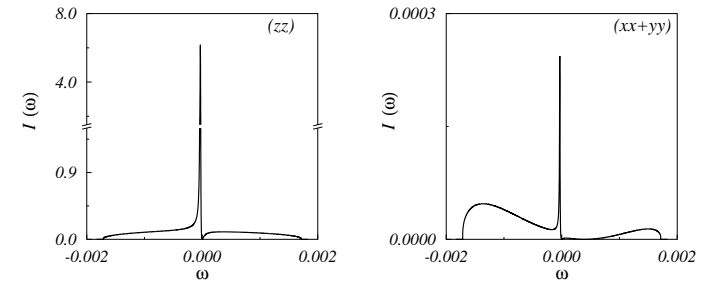


Рис. 4. Інтенсивність комбінаційного розсіяння для випадку zz та $xx + yy$ поляризації при $T = 0.03$, $W = 0.1$, $n = 0.2$, $h = 0.25$, $\Omega = 0.21$.

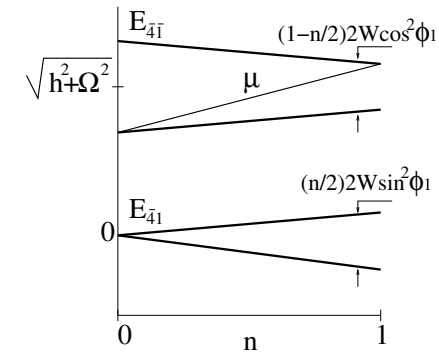


Рис. 5. Залежність країв зони та хімічного потенціалу від концентрації при $T = 0$.

З рис. 1-4 видно, що інтенсивність комбінаційного розсіяння світла для випадку zz поляризації є більшою ніж для $xx + yy$ поляризації. Отримані спектри мають складну структуру, положення піку залежить від величини параметра h , який відповідає за асиметрію потенціалу з двома мінімумами та залежить від симетрії кристалу (яка міняється при зміні складу для кристалів типу $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$). У експериментах по комбінаційному розсіянню світла у кристалах $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ (коли йде мова про спектри, пов'язані з коливаннями алексного кисню O4) також відзначається складна структура спектрів та залежність позиції піку від ступеня легування, результуючий спектр є накладанням спектрів співіснуючих мікрофаз (при цьому положення піку є різним для різних фаз) [4, 5]. Крім цього експери-

ментальні дані підтверджують, що має місце ускладнення фононних ліній внаслідок впливу електронного континууму [9, 10].

Ми розглянули розсіяння, пов'язане із переходами між зонами $\varepsilon_{41}, \varepsilon_{4\bar{1}}$ і отримали пік на частоті порядку $\sqrt{h^2 + \Omega^2}$. Якщо б ми розглядали внески в розсіяння, пов'язані із переходами між іншими зонами, то отримали б і інші піки. Зокрема, при нехтуванні електронним переносом, це були б піки на частоті $\sqrt{(h - gn)^2 + \Omega^2}$ та $\sqrt{(h - 2gn)^2 + \Omega^2}$ [21]. При зміні ступеня легування положення цих піків буде мінятися як завдяки зміні електронної концентрації n , так і завдяки зміні величини h . Зауважимо, що локальне значення поля h може мінятися при зміні ступеня легування киснем δ . Наявність кисневих вакансій у близькому оточенні міняє форму і характер асиметрії ефективного потенціалу для кисню O4 (див. [41–43]).

Отримані нами спектри можуть мати також відношення до систем з водневими зв'язками, які містять іони металів та володіють електронною провідністю [44]. На жаль, експериментальних даних по комбінаційному розсіянню в таких системах є дуже мало.

7. Випадок слабкої псевдоспін-електронної взаємодії

Розглянемо випадок слабкого зв'язку в псевдоспін-електронній моделі ($U = 0$, $g \ll W$, W - півширина електронної зони, яка в даному випадку не розщеплюється). Електронний спектр та термодинаміка ПЕМ для цього випадку були досліджені в [38]. При розрахунку сприйнятливості було використано наближення хаотичних фаз (НХФ), чотирьохполюсні вершини ефективної взаємодії між електронами формувалися кумулянтними та бозонними функціями Гріна, побудованими на S^z та S^\pm операторах.

Щоб знайти оператор поляризованості, використаємо підхід, що базується на розщепленні рівнянь руху для неусереднених функцій Гріна. Розщеплення рівнянь руху буде зроблено по аналогії до розщеплення для звичайних "усереднених" функцій Гріна в НХФ. У попередньому параграфі та роботі [21] було розглянено випадок шаруваті квазідвовимірної кристалічної структури типу $YBaCuO$ з переносом електронів лише в площинах та з врахуванням різних компонент поляризації - "поперечної" (перпендикулярної до площин) та компоненти, паралельної до площини. Для "поперечної" компоненти $eR^z \equiv d_e = const$, тоді дипольний момент комірки

$$M_n^z = d_e \sum_{\sigma} a_{n\sigma}^+ a_{n\sigma} + d_s S_n^z. \quad (90)$$

В операторі поляризованості з'являться електронні, псевдоспінні та змішані внески. Розглянемо спершу електронні внески.

В k -представленні електронна складова запишеться

$$M^z(\vec{q}) = \sum_n M_n^z e^{ikR_n} = d_e \sum_{k\sigma} \alpha_{k\sigma}^+ \alpha_{k+q,\sigma}. \quad (91)$$

Таким чином, щоб побудувати оператор поляризованості P^z у явному вигляді, необхідно у деякому наближенні розрахувати функцію Гріна виду $\{\{\alpha_{k_1\sigma}^+ \alpha_{k_2\sigma} | \alpha_{k_3\sigma'}^+ \alpha_{k_4\sigma'}\}\}$. Для слабкого псевдоспін-електронного зв'язку доцільно розділити гамільтоніан на основну частину та на збурення [38]

$$H = H_0 + H_{int} \quad (92)$$

$$H_0 = -\lambda \sum_i \sigma_i^z - gNn\eta + \sum_{k\sigma} \varepsilon_k n_{k\sigma}; \quad \varepsilon_k = g\eta - \mu + tk$$

$$H_{int} = g \sum_{kk'\sigma} \alpha_{k\sigma}^+ \alpha_{k'\sigma} \tilde{S}^z(k - k') - ng \left(\sum_i S_i^z - N\eta \right),$$

де у якості гамільтоніану нульового наближення H_0 взято гамільтоніан середнього поля, який діагоналізується після перетворення повороту

$$\begin{aligned} S_i^z &= \sigma_i^z \cos \theta + \sigma_i^x \sin \theta \\ S_i^x &= \sigma_i^x \cos \theta - \sigma_i^z \sin \theta \\ \sin \theta &= \Omega/\lambda; \quad \lambda = \sqrt{(gn - h)^2 + \Omega^2}. \end{aligned} \quad (93)$$

У гамільтоніані збурення H_{int} міститься відхилення від середнього значення псевдоспіна, для його запису використано позначення

$$\tilde{S}^z(k - k') = S^z(k - k') - \eta\delta(k - k'). \quad (94)$$

Виходячи з рівнянь руху для неусереднених функцій Гріна (10), матимемо:

$$\begin{aligned} \{\{\alpha_{k_1\sigma}^+ \alpha_{k_2\sigma} | \alpha_{k_3\sigma'}^+ \alpha_{k_4\sigma'}\}\}_{\omega_1\omega_2} &= \frac{1}{2\pi} \frac{[\alpha_{k_1\sigma}^+ \alpha_{k_2\sigma}, \alpha_{k_3\sigma'}^+ \alpha_{k_4\sigma'}]_{\omega_1 - \omega_2}}{\omega_1 - \epsilon_{k_2} + \epsilon_{k_1}} + \\ &\frac{g}{\omega_1 - \epsilon_{k_2} + \epsilon_{k_1}} \sum_{k'} \{\{\tilde{S}^z(k_2 - k') \alpha_{k_1\sigma}^+ \alpha_{k'\sigma} | \alpha_{k_3\sigma'}^+ \alpha_{k_4\sigma'}\}\}_{\omega_1\omega_2} - \\ &\frac{g}{\omega_1 - \epsilon_{k_2} + \epsilon_{k_1}} \sum_{k'} \{\{\tilde{S}^z(k' - k_1) \alpha_{k'\sigma}^+ \alpha_{k_2\sigma} | \alpha_{k_3\sigma'}^+ \alpha_{k_4\sigma'}\}\}_{\omega_1\omega_2}. \end{aligned} \quad (95)$$

Застосуємо процедуру "розщеплення" з метою апроксимації неусередненої функції Гріна вищого порядку:

$$\begin{aligned} & \{ \{ \tilde{S}^z(k_2 - k') \alpha_{k_1\sigma}^+ \alpha_{k'\sigma} | \alpha_{k_3\sigma'}^+ \alpha_{k_4\sigma'} \} \} \approx \\ & \langle \alpha_{k_1\sigma}^+ \alpha_{k'\sigma} \rangle \{ \{ \tilde{S}^z(k_2 - k') | \alpha_{k_3\sigma'}^+ \alpha_{k_4\sigma'} \} \}. \end{aligned} \quad (96)$$

При усередненні обох сторін в (96) ми отримуємо відоме наближення типу розщеплення для звичайних усереднених функцій Гріна, яке було використане в [38] для розрахунку аналогічних температурних функцій Гріна (і яке для цього випадку співпало з наближенням хаотичних фаз). В результаті нам треба знайти функцію $\{ \{ \tilde{S} | \alpha^+ \alpha \} \}$, для якої знову записуємо рівняння руху:

$$\begin{aligned} & \omega_1 \{ \{ \tilde{S}^z(k_2 - k') | \alpha_{k_3\sigma'}^+ \alpha_{k_4\sigma'} \} \} = \omega_1 \sin \theta \{ \{ \sigma^x(k_2 - k') | \alpha_{k_3\sigma'}^+ \alpha_{k_4\sigma'} \} \} = \\ & \sin \theta \lambda \{ \{ i \sigma^y(k_2 - k') | \alpha_{k_3\sigma'}^+ \alpha_{k_4\sigma'} \} \}; \quad (97) \\ & \omega_1 \{ \{ i \sigma^y(k_2 - k') | \alpha_{k_3\sigma'}^+ \alpha_{k_4\sigma'} \} \}_{\omega_1 \omega_2} = \lambda \{ \{ \sigma^x(k_2 - k') | \alpha_{k_3\sigma'}^+ \alpha_{k_4\sigma'} \} \}_{\omega_1 \omega_2} \\ & + g \sin \theta \langle \sigma^z \rangle \frac{1}{N} \sum_{k_5\sigma} \{ \{ \alpha_{k_5+k'-k_2\sigma}^+ \alpha_{k_5\sigma} | \alpha_{k_3\sigma'}^+ \alpha_{k_4\sigma'} \} \}_{\omega_1 \omega_2}, \end{aligned}$$

де враховано, що в прийнятому наближенні $[\sigma_i^z, H] = 0$. В результаті отримується

$$\begin{aligned} & \{ \{ \tilde{S}^z(k_2 - k') | \alpha_{k_3\sigma'}^+ \alpha_{k_4\sigma'} \} \}_{\omega_1 \omega_2} = \\ & \frac{g \lambda \sin^2 \theta \langle \sigma^z \rangle}{\omega_1^2 - \lambda^2} \frac{1}{N} \sum_{k_5\sigma} \{ \{ \alpha_{k_5+k'-k_2\sigma}^+ \alpha_{k_5\sigma} | \alpha_{k_3\sigma'}^+ \alpha_{k_4\sigma'} \} \}_{\omega_1 \omega_2}. \end{aligned} \quad (98)$$

Підставивши цей вираз у (95), отримуємо

$$\begin{aligned} & \sum_{\sigma\sigma'} \{ \{ \alpha_{k_1\sigma}^+ \alpha_{k_2\sigma} | \alpha_{k_3\sigma'}^+ \alpha_{k_4\sigma'} \} \}_{\omega_1 \omega_2} = \\ & \frac{1}{2\pi} \sum_{\sigma\sigma'} \frac{[\alpha_{k_1\sigma}^+ \alpha_{k_2\sigma}, \alpha_{k_3\sigma'}^+ \alpha_{k_4\sigma'}]_{\omega_1 - \omega_2}}{\omega_1 - \epsilon_{k_2} + \epsilon_{k_1}} + \\ & \frac{g^2 \lambda \sin^2 \theta \langle \sigma^z \rangle}{\omega_1^2 - \lambda^2} \sum_{\sigma} \frac{n_{k_1} - n_{k_2}}{\omega_1 - \epsilon_{k_2} + \epsilon_{k_1}} \times \\ & \sum_{\sigma\sigma'} \frac{1}{N} \sum_{k_5} \{ \{ \alpha_{k_5+k_1-k_2,\sigma}^+ \alpha_{k_5\sigma} | \alpha_{k_3\sigma'}^+ \alpha_{k_4\sigma'} \} \}_{\omega_1 \omega_2}. \end{aligned} \quad (99)$$

Просумувавши обидві сторони цього рівняння по k_2 , отримуємо рів-

няння, з якого можна визначити:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{N} \sum_{k_2} \sum_{\sigma\sigma'} \{ \{ \alpha_{k_2+q,\sigma}^+ \alpha_{k_2\sigma} | \alpha_{k_3\sigma'}^+ \alpha_{k_4\sigma'} \} \}_{\omega_1 \omega_2} = \frac{1}{1 - g^2 \Sigma(\omega_1) \Pi_q(\omega_1)} \times \\ & \frac{1}{2\pi} \sum_{\sigma\sigma'} \frac{1}{N} \sum_{k_2} \frac{[\alpha_{k_2+q,\sigma}^+ \alpha_{k_2\sigma}, \alpha_{k_3\sigma'}^+ \alpha_{k_4\sigma'}]_{\omega_1 - \omega_2}}{\omega_1 - \epsilon_{k_2} + \epsilon_{k_2+q}}, \end{aligned} \quad (100)$$

де $\vec{q} = \vec{k}_1 - \vec{k}_2$, після підстановки в (99) матимемо остаточний вираз для $\{ \{ \alpha^+ \alpha | \alpha^+ \alpha \} \}$. Введемо позначення

$$\Sigma(\omega) = \sin^2 \theta \frac{\lambda \langle \sigma^z \rangle}{\omega^2 - \lambda^2}; \quad \Pi_q(\omega) = \frac{1}{N} \sum_k \frac{n_k - n_{k-q}}{\omega + \epsilon_k - \epsilon_{k-q}}. \quad (101)$$

Для відповідних температурних функцій Гріна у НХФ [38] дані величини мають зміст, відповідно, незвідної власноенергетичної частини (при $\omega \neq 0$) та незбуреної електронної поляризованості (яка з множителем g^2 характеризує ефективну взаємодію між псевдоспінами). Таким чином, для неусередненої функції Гріна, побудованої на електронній складовій оператора дипольного моменту M^z , матимемо:

$$\begin{aligned} & \{ \{ M^z(-\vec{q}) | M^z(\vec{q}') \} \}_{\omega_1, \omega_2} = \frac{1}{2\pi} d_e^2 \frac{1}{1 - g^2 \Sigma(\omega_1) \Pi_q(\omega_1)} \times \\ & \frac{1}{N} \sum_{k\sigma} \frac{[\alpha_{k+q,\sigma}^+ \alpha_{k+q',\sigma} - \alpha_{k+q-q',\sigma}^+ \alpha_{k,\sigma}]_{\omega_1 - \omega_2}}{\omega_1 - \epsilon_k + \epsilon_{k+q}}. \end{aligned} \quad (102)$$

Очевидно, що після статистичного усереднення даний вираз переходить у формулу для електронної частини ($\sim \langle \langle n | n \rangle \rangle$) зарядової сприйнятливості ПЕМ для випадку слабого зв'язку:

$$\chi_{el}(\omega) = \frac{1}{2\pi} d_e^2 \frac{\Pi_q(\omega)}{1 - g^2 \Sigma(\omega) \Pi_q(\omega)}. \quad (103)$$

Подібним способом можна розрахувати змішані та псевдоспінові внески в оператор поляризованості. Для відповідних неусереднених функцій Гріна отримується:

$$\begin{aligned} & d_s \{ \{ \tilde{S}^z(-\vec{q}) | M^z(\vec{q}') \} \}_{\omega_1, \omega_2} = \frac{1}{2\pi} d_s d_e \frac{g \Sigma(\omega_1)}{1 - g^2 \Sigma(\omega_1) \Pi_q(\omega_1)} \times \\ & \frac{1}{N} \sum_{k\sigma} \frac{[\alpha_{k+q,\sigma}^+ \alpha_{k+q',\sigma} - \alpha_{k+q-q',\sigma}^+ \alpha_{k,\sigma}]_{\omega_1 - \omega_2}}{\omega_1 - \epsilon_k + \epsilon_{k+q}} \end{aligned} \quad (104)$$

$$d_s^2 \{ \{ \tilde{S}^z(-\vec{q}) | \tilde{S}^z(\vec{q}') \} \}_{\omega_1, \omega_2} = \frac{1}{2\pi} d_s^2 \frac{\Sigma(\omega_1)}{\sin \theta \langle \sigma^z \rangle} \times \quad (105)$$

$$\frac{[\omega_1 \sigma^z(\vec{q}' - \vec{q}) \sin \theta - \omega_1 \sigma^x(\vec{q}' - \vec{q}) \cos \theta - \lambda i \sigma^y(\vec{q}' - \vec{q}) \cos \theta]_{\omega_1 - \omega_2}}{\omega_1 (1 - g^2 \Sigma(\omega_1) \Pi_q(\omega_1))}$$

$$d_s \{ \{ M^z(-\vec{q}) | \tilde{S}^z(\vec{q}') \} \} = \frac{d_e}{d_s} g \Pi_q(\omega_1) \{ \{ \tilde{S}^z(-\vec{q}) | \tilde{S}^z(\vec{q}') \} \} \quad (106)$$

Відзначимо, що вирази (104) і (106) мають різну структуру, хоча після статистичного усереднення вони приводять до однакових результатів (оскільки повинна виконуватися умова належної відповідності між функціями $\langle \langle M | S^z \rangle \rangle$ і $\langle \langle S^z | M \rangle \rangle$). Якщо б ми хотіли симетризувати вирази (104) і (106), то потрібно було б будувати рівняння руху, диференціюючи як за правим, так і за лівим аргументом. Зокрема, якщо б ми застосували описану вище схему але диференціювали по правому аргументу, то замість (105) ми б отримали

$$d_s^2 \{ \{ \tilde{S}^z(-\vec{q}) | \tilde{S}^z(\vec{q}') \} \}_{\omega_1, \omega_2} = \frac{1}{2\pi} d_s^2 \frac{\Sigma(\omega_2)}{\sin \theta \langle \sigma^z \rangle} \times \quad (107)$$

$$\frac{[\omega_2 \sigma^z(\vec{q}' - \vec{q}) \sin \theta - \omega_2 \sigma^x(\vec{q}' - \vec{q}) \cos \theta + \lambda i \sigma^y(\vec{q}' - \vec{q}) \cos \theta]_{\omega_1 - \omega_2}}{\omega_2 (1 - g^2 \Sigma(\omega_2) \Pi_{q'}(\omega_2))}$$

Ми розглядали електронну складову дипольного моменту, записану у формі $M_i^z = \sum_{\sigma} d_e a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma}$. При розгляді дипольного моменту, записаного у вигляді $M_i^{\alpha} = R_i^{\alpha} a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma}$, $\alpha = x, y$, можна зауважити таку властивість:

$$\frac{-i}{d_e} \frac{\partial M^z(q)}{\partial q_{\alpha}} = M^{\alpha}(q) \quad (108)$$

Таким чином, для неусередненої функції Гріна, побудованої на операторах $M^{x,y}$, отримується такий вираз:

$$\{ \{ M^{\alpha}(-\vec{q}) | M^{\alpha'}(\vec{q}') \} \} = \frac{1}{d_e^2} \frac{\partial^2}{\partial q_{\alpha} \partial q'_{\alpha'}} \{ \{ M^z(-\vec{q}) | M^z(\vec{q}') \} \} \quad (109)$$

Легко бачити, що такі похідні приведуть до появи під сумою по хвильовому вектору похідних від енергій $\partial \varepsilon_q / \partial q$. Подібним чином запишуться вирази для інших функцій Гріна:

$$\{ \{ M^{\alpha}(-\vec{q}) | S^z(\vec{q}') \} \} = \frac{i}{d_e} \frac{\partial}{\partial q_{\alpha}} \{ \{ M^z(-\vec{q}) | S^z(\vec{q}') \} \} \quad (110)$$

$$\{ \{ S^z(-\vec{q}) | M^{\alpha}(\vec{q}') \} \} = \frac{-i}{d_e} \frac{\partial}{\partial q'_{\alpha}} \{ \{ S^z(-\vec{q}) | M^z(\vec{q}') \} \} \quad (111)$$

При розрахунку тензора розсіяння за допомогою співвідношення (72) виникне потреба в розрахунку функцій Гріна типу $\langle \langle \sigma^{z,x,y} | \sigma^{z,x,y} \rangle \rangle$, $\langle \langle n | \sigma^{z,x,y} \rangle \rangle$, $\langle \langle \sigma^{z,x,y} | n \rangle \rangle$, $\langle \langle n | n \rangle \rangle$. Такого типу функції були розраховані в роботі [38] в НХФ, там же було досліджено поведінку уявної частини згаданих вже функцій Гріна (як видно з формули (72), саме уявна частина функції Гріна дає інформацію про спектр комбінаційного розсіяння).

Було виявлено, що в системі присутні псевдоспін-хвильові збудження, що визначаються полосою усереднених дипольних функцій Гріна типу $\langle \langle S^z | S^z \rangle \rangle$ (див. [38]) а також збудження, пов'язані з електронними переходами. Вклад останніх в інтенсивність розсіяння є малим в довгохвильовій границі, тому їх можна було б виявити в експериментах по розсіянню рентгенівських променів.

Наведемо спектр псевдоспін-хвильових та збуджень, пов'язаних із електронними переходами. Розглядатимемо випадок, коли зона майже заповнена (подібна картина є і для випадку, коли зона майже пуста), хімпотенціал задовільняє умові $\mu \lesssim W + g\eta$, $T \rightarrow 0$. Можна отримати наступний вираз для спектру псевдоспін-хвильових збуджень (при малих значеннях хвильового вектора q) [38]

$$\omega_{ps} \approx \lambda + g^2 \sin^2 \theta \tanh \frac{\beta \lambda k^{*2} t q^2}{2 \cdot 4\pi \lambda^2} \quad (\omega > 2tk^*q + q^2t) \quad (112)$$

$$\omega_{ps} \approx \lambda + g^2 \sin^2 \theta \tanh \frac{\beta \lambda k^{*2}}{2 \cdot 4\pi \lambda^2} \frac{t q^2}{\lambda^2 - (tq^2)^2} \quad (\omega < -2tk^*q + q^2t),$$

де $k^* = \sqrt{\frac{W+g\eta-\mu}{t}}$, $t = W/4$,

На рис. 6 потовщеною суцільною лінією позначено спектр псевдоспін-хвильових збуджень, заштрихована область відповідає неперервному спектру електронних збуджень. Слід відзначити, що в частотних діапазонах $\omega > 2tk^*q + q^2t$; $\omega < -2tk^*q + q^2t$ уявна частина Π_q рівна нулю, тому в спектрі комбінаційного розсіяння буде присутній досить вузький пік (в ідеалі це δ - пік, але в реальних системах він матиме певну ширину завдяки різним чинникам - процесам розсіяння збуджень, пов'язаним з їх взаємодією, домішкам, неоднорідностям і т.д.), який пов'язаний із згаданими вже псевдоспін-хвильовими збудженнями. У заштрихованій області уявна частина Π_q відмінна від нуля і в спектрі комбінаційного розсіяння вклад від збуджень, пов'язаних з електронними переходами, проявиться у вигляді розмитої смуги (для малих значень q це низькочастотний діапазон).

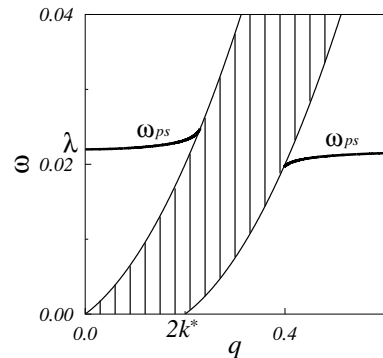


Рис. 6. Спектр збуджень системи. $\mu = 1.22$, $\Omega = 0.01$, $T = 0$, $h \approx 1.02$, $k^* = 0.1$, $W = 1$, $g = 0.5$.

Можливість появи низькочастотного внеску в спектрі при рентгенівському розсіянні відзначалася в роботі [18]. У згаданій роботі було досліджено розсіяння для випадку моделі Фалікова-Кімбала у границі $d \rightarrow \infty$, при цьому для спектру отримувалася подібна до нашої картина розсіяння: широкий пік на частоті порядку величини взаємодії між рухомими та нерухомими частинками та згадана вже низькочастотна частина (яка пропадала при $q \rightarrow 0$).

Певну аналогію можна встановити між знайденим нами спектром та спектрами, що отримуються при розгляді зонних електронів з кулонівською взаємодією [16] та електронного газу [45]. У таких системах виділяють спектр неперервних одночастинкових збуджень та колективні (плазмонні) збудження (у нашому випадку роль останніх відіграють псевдоспін-хвильові збудження).

Картина отриманого спектру є також подібною до того, що існує для магнітних систем, коли застосовується НХФ при дослідженні феромагнетика з колективізованими електронами, що описується гамільтоніаном Хаббарда (див. [46]). Для таких систем виявлено присутність спін-хвильових збуджень та широкого спектру стонерівських збуджень, такі два спектри можуть накладатися один на одного. Схожу картину було виявлено для s-d моделі (див. [47]), де враховувалися колективізовані електрони та локалізовані спіни. В рамках НХФ було показано, що існують дві гілки спін-хвильових збуджень (оптична та акустична) та перенормований спектр стоне-

рівських збуджень. Механізм, що приводить в магнітних системах до появи спін-хвильових чи магнітонних збуджень, пов'язаний з взаємодією між електронами та з взаємодією електронів із спінами. В ПЕМ існує аналогічний механізм: псевдоспін-хвильові збудження пов'язані з присутністю псевдоспінів та їхньою взаємодією з електронами. Як відзначається в роботі [18], на даний момент є дуже мало експериментальних даних по спектрах електронного розсіяння в сильно скорельованих системах (в основному експериментальні дослідження проводяться з метою виявлення колективних збуджень - типу плазмонів, магнітонів), тому у даному випадку теорія випереджує експеримент.

8. Висновки

У цій роботі досліджено внески в комбінаційне розсіяння світла для моделі Фалікова-Кімбала та псевдоспін-електронної моделі. Розглянуто два альтернативні підходи для знаходження оператора поляризованості. Один з них полягає у вираженні оператора поляризованості через "неусереднені" функції Гріна, побудовані на операторах дипольного моменту. В іншому підході явно виділяються резонансні та нерезонансні внески, причому резонансні внески пов'язані із "неусередненими" функціями Гріна, побудованими на операторах швидкостей, в той час як нерезонансні внески залежать від характеру дисперсії зонного спектру та є пропорційними до другої похідної від енергії по хвильовому вектору. Показано, що ці два підходи є еквівалентними в границі $q \rightarrow 0$. У рамках наближення сильного зв'язку при виділенні одного орбітального стану на атомі (одної електронної зони) для нерезонансної складової було отримано вираз, у який входить тензор оберненої ефективної маси. У стандартних підходах такого типу нерезонансну складову отримують за рахунок перенормування, що пов'язане із внесками від електронних переходів до інших зон.

Запропоновано мікроскопічний підхід для отримання аналітичного виразу для оператора поляризованості, що базується на операторних розкладах, цей підхід апробовано для випадків моделі Фалікова-Кімбала та ПЕМ. Для ПЕМ враховано електронні та псевдоспінівні внески в дипольний момент.

Для випадку сильної псевдоспін-електронної взаємодії в ПЕМ встановлено присутність в спектрі когерентного (типу δ - піку) та некогерентного (у формі зони скінченної ширини) внесків, які розділяються при низьких температурах та накладаються один на одного

при високих температурах. Отримані спектри мають складну структуру, характерною є асиметрія ліній та залежність їх форми від електронної концентрації та температури. В загальному, наші результати узгоджуються з експериментальними дослідженнями комбінаційного розсіяння в кристалах типу YBaCuO (коливання апексного кисню) [4, 5].

Для випадку слабкої псевдоспін-електронної взаємодії спектр КР складається із δ - піку, що відповідає псевдоспін-хвильовим збудженням та розмитого спектру, пов'язаного із електронними переходами, ці два спектри можуть накладатися один на одного.

Слід відзначити, що присутність в спектрі комбінаційного розсіяння світла внеску, пов'язаного із псевдоспін-хвильовими колективними збудженнями, є підтверджена для сегнетоелектриків типу лад-безлад, в яких є присутній водневий зв'язок і дипольний момент містить внесок, пов'язаний із присутністю протонів у двоїчному потенціалі (див. [48]).

В цілому, як бачимо, є певна подібність між спектрами, отриманими для випадку слабкої та сильної взаємодії. Однак можна зробити попередній висновок про те, що ВТНП типу YBaCuO в рамках ПЕМ краще описувати з врахуванням сильного зв'язку, оскільки дані по комбінаційному розсіянню в таких системах [5] свідчать, що існує резонансне наростання інтенсивності для певного діапазону частоти падаючого світла. Таке резонансне зростання можна було б відтворити для випадку сильної взаємодії, коли енергія кванта падаючого світла є близькою за величиною до щілини між зонами (слід зауважити, що для випадку слабого зв'язку зона не розщеплюється і тому резонансу на міжзонних переходах не буде).

Досліджені нами спектри КР для ПЕМ, крім високотемпературних надпровідників, можуть мати також застосування до систем з водневими зв'язками, що містять металічні іони і володіють електронною провідністю [44]. Інтенсивні експериментальні дослідження КР в таких системах лише розпочинаються, тому наші теоретичні розрахунки у даному випадку можуть тільки прогнозувати дані експерименту.

Автори висловлюють вдячність Українському державному фонду фундаментальних досліджень (проект номер 02.07/266) за підтримку цієї роботи.

Література

1. P. Fleury, R. Loudon, Phys. Rev., **166**, 514 (1968)

2. B.S. Shastry, B.I. Shraiman, Phys. Rev. Lett., **65**, 1068 (1990)
3. Chubukov A.V., Frenkel D.M. // Phys. Rev. B, 1995, vol.52, p.9760; cond-mat/9503010
4. Ulivi L., Zoppi M. // Journ. Eur. Cer. Soc., Fourth Euro Ceramics, Proc. 4th Eur. Ceram. Soc. Conf. 1995, vol. 6, High Tc Superconductors- Part 1, p. 35-40.
5. Iliiev M.N., Hadjiev V.G, Ivanov V.G. // Journ. Raman Spectr., 1996, vol. 27, p. 333-342.
6. Cooper S.L. Electronic and Magnetic Raman Scattering Studies of the High- T_c Cuprates. Handbook on the Physics and Chemistry of Rare Earths, vol. 31, chapter 203 Elsevier Science B.V., 2001.
7. Thomsen C., Kaczmarczyk. Vibrational Raman Spectroscopy of High-temperature Superconductors. Handbook of Vibrational Spectroscopy. Editors: Chalmers J.M., Griffiths P.R. John Wiley & Sons Ltd, Chichester, 2002
8. E.Ya. Sherman, O.V. Misochko, P. Lemmens. What can one learn from Raman Spectra of High Temperature Superconductors?, in "Spectroscopy of High Temperature Superconductors", p. 97-157, Ed. N.M. Plakida, Taylor & Francis Inc, London and New York, ISBN 0415288088 (2003).
9. Faulques E., Ivanov V.G. // Phys. Rev. B, 1997, vol. 55, p. 3974-3986.
10. О.В.Мисочко, Е.Я.Шерман. // ФТТ, 1998, т.40, н.1, с.27-31
11. Ambrosch-Draxl C., Kouba R., Knoll P. // Z Phys. B, 1997, v.104, p. 687
12. Sherman E.Ya., Ambrosch-Draxl C. // Eur. Phys. J. B, 2000, vol.16, p.251
13. Ambrosch-Draxl C., Auer H., Kouba R., Sherman E.Ya. // Phys. Rev.B, 2002, v.65, p.064501
14. Merino J., McKenzie R.H. // cond-mat/0007173
15. Blum F.A. // Phys. Rev. B, 1970, vol. 1, No. 3, p.1125-1135
16. Sarma S.D, Daw-Wei Wang // Phys. Rev. Lett. 1999, vol. 83, Iss. 4, pp. 816-819.; cond-mat/9906300; cond-mat/0108468
17. Freericks J.K., Devereaux T.P. // Phys. Rev. B, 2001, vol. 64, 125110.
18. Devereaux T.P., G.E.D. McCormack, Freericks J.K. // Phys. Rev. B, 2003, vol. 68, 075105.
19. Freericks J.K., Devereaux T.P., Bulla R., Pruschke Th. // Phys. Rev. B, 2003, vol. 67, 155102.
20. Shvaika A.M, Vorobyov O, Freericks J.K, Devereaux T.P. // cond-mat/0311070.
21. Stasyuk I.V., Mysakovych T.S. // Journ. Phys Studies, 1999, vol. 3,

- №. 3, p. 344–358.
22. Рассеяние света в твердых телах. Под ред. М.Кардоны, 1979, Москва, "Мир".
 23. Стасюк И.В., Иванкив Я.Л. Комбинационное рассеяние света в кристаллах с упорядочивающимися элементами структуры. Препринт ИТР-87-57Р, Институт теоретичної фізики, Київ, 1987.
 24. Stasyuk I.V., Mysakovych T.S. // *Cond. Matt. Phys.*, 2000, vol. 3, No. 1 (21), pp. 183–200
 25. Barrie R., Sharpe I.W. // *Can. J. Phys.*, 1978, v.56, p.550–559
 26. Абрикосов А.А., Генкин В.М. // *ЖЕТФ*, 1973, т. 65, вып. 2, с. 842
 27. Brandt. U, Mielsch C. // *Z Phys. B*, 1989, vol. 75, p. 365, 1990, vol. 79, p. 295, 1991, vol. 82, p. 37
 28. Freericks J.K. // *Phys. Rev. B*, 1993, vol. 47, p. 9263, vol. 48, p. 14797
 29. Falicov L.M, Kimball J.K. // *Phys. Rev. Lett.*, 1969, vol. 22, p.997.
 30. Müller K.A. // *Z. Phys. B*, 1990, vol. 80, p. 193.
 31. Hirsch J.E., Tang S. // *Phys. Rev. B.*, 1989, vol. 40, p. 2179.
 32. Frick M., von der Linden W., Morgenstern I., Raedt H. // *Z. Phys. B - Cond. Mat.*, 1990, vol. 81, p. 327.
 33. Stasyuk I.V., Shvaika A.M., Schachinger E. // *Physica C.*, 1993, vol. 213., p. 7.
 34. Stasyuk I.V., Shvaika A.M. // *Condens. Matter Phys.*, 1994., No. 3., p. 134–175.
 35. Stasyuk I.V., Havrylyuk Yu. // *Cond. Matter Phys.*, 1999., vol. 2., p. 487.
 36. Stasyuk I.V., Danyliv O.D. // *Phys.Stat.Sol. B.*, 2000, vol. 219, p. 299.
 37. Stasyuk I.V., Shvaika A.M., Tabunshchuk K.V. // *Cond. Matter Phys.*, 1999,- vol. 2, p. 109.
 38. Stasyuk I.V., Mysakovych T.S. // *Cond. Matt. Phys.*, 2002, vol. 5, No. 3 (31), pp. 473–491
 39. Mysakovych T.S., Stasyuk I.V. // *Ukr. J. Phys.*, vol. 49, No 6, pp.607-616
 40. Slobodyan P.M., Stasyuk I.V. // *Teor. Mat. Fiz.*, 1974, vol. 19, p. 423
 41. J. Röhler". Evidence from EXAFS for an axial oxygen centered lattice instability in $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ ", ed. E. Kaldis, in "Materials and crystallographic aspects of HT_c -superconductivity", p. 353-372", Kluwer Academic Publishers The Netherlands, 1994.
 42. Stasyuk I.V., Velychko O.V. New type phase transitions in the Mitsui model with bimodal random field. // *Condens. Matter Phys.*, 1999, vol. 2, No. 4(20), p. 595–602.

43. Stasyuk I.V., Velychko O.V. Influence of oxygen nonstoichiometry on localization of apex oxygens in $YBa_2Cu_3O_{7-x}$ crystals. // *Ukrainian J. Phys.*, 1999, vol. 44, No. 6, p. 772–781.
44. Okaniwa K., Okamoto H., Nakasuji K., Toyota J., Yamashita M. // *J. Phys. Soc. Japan*, 1991, vol. 60, No. 3, p. 997–1003
45. Mishchenko E.G. // *Phys. Rev. B* vol. 59, 14892-14895 (1999)
46. Уайт Р.М. Квантовая теория магнетизма, Москва, Мир, 1972
47. Кузьмин Е.В., Петраковский Г.А., Завадский З.А., Физика магнитоупорядоченных веществ, Новосибирск, Наука, 1976
48. Блинц Р., Жекш Б. Сегнетоэлектрики и антисегнетоэлектрики. Динамика гратки. Москва, Мир, 1975

Препринти Інституту фізики конденсованих систем НАН України розповсюджуються серед наукових та інформаційних установ. Вони також доступні по електронній комп'ютерній мережі на WWW-сервері інституту за адресою <http://www.icmp.lviv.ua/>

The preprints of the Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine are distributed to scientific and informational institutions. They also are available by computer network from Institute's WWW server (<http://www.icmp.lviv.ua/>)

Ігор Васильович Стасюк
Тарас Степанович Мисакович

КОМБІНАЦІЙНЕ РОЗСІЯННЯ СВІТЛА В СИСТЕМАХ З
ЛОКАЛЬНО-АНГАРМОНІЧНИМИ ЕЛЕМЕНТАМИ СТРУКТУРИ

Роботу отримано 10 вересня 2004 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку семінаром відділу квантової статистики

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені