КОМБІНАЦІЙНЕ РОЗСІЯННЯ СВІТЛА В СИЛЬНОСКОРЕЛЬОВАНИХ ЕЛЕКТРОННИХ СИСТЕМАХ. НАБЛИЖЕННЯ СИЛЬНОГО ЗВ'ЯЗКУ

І. В. Стасюк, Т. С. Мисакович
Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України,
вул. Свєнціцького, 1, Львів, 79011

(Отримано 14 грудня 2005 р.; в остаточному вигляді — 17 лютого 2006 р.)

Для розрахунку диференціяльного перерізу комбінаційного розсіяння світла використано мікроскопічну схему, що базується на представленні оператора поляризованости через "неусереднену" функцію Ґріна, побудовану на операторах дипольного моменту. Для наближення сильного зв'язку встановлено співвідношення цього методу з підходом, у якому явно виділяються т. зв. нерезонансні та резонансні внески в розсіяння.

Проаналізовано внески в оператор поляризованости для моделі Фалікова–Кімбала та псевдоспін-електронної моделі при слабкій псевдоспін-електронній взаємодії.

Ключові слова: комбінаційне розсіяння світла, псевдоспін-електронна модель, модель Фалікова–Кімбала.

PACS number(s): 78.30.−j, 71.10.Fd, 71.10.−w, 71.27.+a

I. ВСТУП

Комбінаційне розсіяння (КР) світла є потужним інструментом для дослідження елементарних збуджень у різних системах, оскільки воно досить чутливе до проявів спінових, електронних та фононних ступенів вільности. Кілька десятиліть за допомогою КР вивчають ґраткову динаміку. Водночас порівняно недавно досліджується електронне КР як у діелектриках і напівпровідниках, так і в металах та надпровідниках. КР світла є важливим засобом вивчення систем із сильними електронними кореляціями, які мають ряд особливих властивостей (нефермі-рідинна поведінка електронів, фазові переходи з модуляцією зарядової густини та зміною валентности, переходи метал–діелектрик і т.д.).

Багато робіт (як експериментальних, так і теоретичних) виконано з метою дослідження низькочастотної динаміки високотемпературних надпровідників (системи типу YBaCuO та інші [1, 2], див. огляди [3–5]), де, крім фононних ліній, виділяють смуги, пов'язані з електронним розсіянням. При цьому відзначається, що фононні лінії мають ускладнену структуру та зазнають деформації внаслідок ефекту неадіябатичности та змін в електронній густині [6, 7]. У праці [2] вказано, що складність структури фононних ліній у спектрі може бути пов'язана зі співіснуванням мікрофаз у кристалах типу YBaCuO (це стосується, зокрема, фононного спектра, пов'язаного з коливаннями апексного кисню O4), тому остаточний спектр є накладанням спектрів співіснуючих фаз.

Останнім часом проблема опису електронного КР стала особливо актуальною завдяки появі нових методів теоретичного вивчення моделей, що використовуються в теорії сильноскорельованих електронних систем, а також завдяки розширенню експериментальних досліджень у цій ділянці та появі нової експериментальної техніки. Окремо можна виділити праці, присвячені вивченню КР поблизу переходу метал–діелектрик [8–10]. З цією метою як базові використовують моделі Фалікова–Кімбала (ФК) та Габбарда, оскільки в таких моделях при певних умовах може наступити згаданий перехід. На основі представлення Шастрі та Шраймана [11] для оператора поляризованости, який формує ефективний переріз розсіяння, дослідження, проведені на основі методу динамічного середнього поля (який є точним у межі $d \to \infty$, d — вимірність простору), виявили наявність так званого піка зарядового переносу та піка низькоенерґетичних збуджень, а також існування ізозбестичної точки (у якій інтенсивність розсіяння не залежить від температури) у спектрі КР [8–10]. Розглянуто окремо резонансні, нерезонансні та змішані внески в КР, резонанс наступав при частоті падаючого світла, близькій до частоти, що відповідає константі локальної взаємодії між частинками [12].

Для ліпшого розуміння процесів, що відбуваються при КР світла в сильноскорельованих системах, цікавим видається розвиток наближених схем розрахунку перерізу КР. Ми зупинимось на двох варіянтах побудови оператора поляризованости КР: перший полягає в розкладі за степенями параметра електронного переносу, другий — у певних наближеннях, що робляться при написанні рівнянь для "неусереднених" функцій Ґріна. У працях [13, 14] в межах першого з цих підходів досліджено частотну залежність інтенсивности розсіяння для псевдоспін-електронної моделі (ПЕМ), розглянуто сильні псевдоспін-електронну та одновузлову електронні взаємодії. Установлено, що спектр розсіяння в цьому випадку в цілому є розщепленим; виявлено наявність у спектрі когерентної та некогерентної складових. У нашій статті докладніше проаналізовано методику, яка використовується для опису КР світла. Буде досліджено слабку псевдоспін-електронну взаємодію в ПЕМ та проаналізовано внески в оператор поляризованости для моделі ФК в межах запропонованого підходу.

II. ДИФЕРЕНЦІЯЛЬНИЙ ПЕРЕРІЗ РОЗСІЯННЯ

Розглядаючи взаємодію заряджених частинок (електронів кристала) з електромагнетним полем з використанням теорії збурень за степенями векторного потенціялу $\boldsymbol{A}$ (яким характеризується електромагнетна хвиля) у другому порядку (коли враховуються процеси поглинання фотона з частотою ω_1, хвильовим вектором $\boldsymbol{q}_1$ і вектором поляризації $\boldsymbol{e}_1$ та випромінювання фотона з частотою ω_2, хвильовим вектором $\boldsymbol{q}_2$ і вектором поляризації $\boldsymbol{e}_2$), отримуємо такий вираз для диференціяльного перерізу розсіяння (див., напр. [3, 15]):

$$\frac{\partial^2\sigma}{\partial\Omega\partial\omega_2} = \frac{\omega_2^4}{c^4}\frac{\omega_2}{\omega_1}\frac{n_2}{n_1}V^2\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{dt}{2\pi}e^{i\omega t}\langle\chi_{21}^{+}(t)\chi_{21}(0)\rangle \equiv \frac{\omega_2^4}{c^4}\frac{\omega_2}{\omega_1}\frac{n_2}{n_1}V^2\sum_{\alpha\alpha'}\rho(E_\alpha)\delta[(E_{\alpha'}-E_\alpha)-\omega]|\langle\alpha'|\chi_{21}|\alpha\rangle|^2, \tag{2.1}$$

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

$$\chi_{21} = \sum_{\mu\nu} e_{2\mu}\chi_{\mu\nu}(\omega_1,\omega_2,\boldsymbol{q}_1,\boldsymbol{q}_2)e_{1\nu}$$

$$\begin{aligned}&\chi_{21}(t) = e^{iHt}\chi_{21}e^{-iHt},\\ &\omega = \omega_1-\omega_2,\end{aligned} \tag{2.2}$$

$\chi_{\mu\nu}$ — тензор поляризованости переходу (використовуємо систему одиниць, де $\hbar = 1$).

Матричний елемент поляризованости [3, 15]

$$\begin{aligned}\langle\alpha'|\chi_{\mu\nu}|\alpha\rangle = &-\frac{e^2}{m\omega_2^2}\frac{1}{V}\langle\alpha'|N(\boldsymbol{q}_1-\boldsymbol{q}_2)|\alpha\rangle\delta_{\mu\nu}\\ &-\frac{c^2}{V\omega_2^2}\sum_{\alpha''}\Big[\frac{\langle\alpha'|Q_\mu(-\boldsymbol{q}_2)|\alpha''\rangle\langle\alpha''|Q_\nu(\boldsymbol{q}_1)|\alpha\rangle}{E_\alpha-E_{\alpha''}+\omega_1}-\frac{\langle\alpha'|Q_\nu(\boldsymbol{q}_1)|\alpha''\rangle\langle\alpha''|Q_\mu(-\boldsymbol{q}_2)|\alpha\rangle}{E_{\alpha''}-E_\alpha+\omega_2}\Big],\end{aligned} \tag{2.3}$$

$$\boldsymbol{Q}(-\boldsymbol{q}) = -\frac{e}{2mc}\sum_j(\boldsymbol{p}_j e^{-i\boldsymbol{q}\boldsymbol{r}_j}+e^{-i\boldsymbol{q}\boldsymbol{r}_j}\boldsymbol{p}_j) = \frac{e}{2mc}\boldsymbol{q}N(\boldsymbol{q})-\frac{e}{c}\boldsymbol{v}(\boldsymbol{q}), \tag{2.4}$$

де $N(\boldsymbol{q}), \boldsymbol{v}(\boldsymbol{q})$ є фур'є-образами операторів густини та швидкостей частинок

$$\begin{aligned}&N(\boldsymbol{q}_1-\boldsymbol{q}_2) = \sum_j e^{-i(\boldsymbol{q}_1-\boldsymbol{q}_2)\boldsymbol{r}_j}\\ &\boldsymbol{v}(\boldsymbol{q}) = \sum_j e^{-i\boldsymbol{q}\boldsymbol{r}_j}\left(-\frac{i}{m}\boldsymbol{\nabla}_j\right);\ \boldsymbol{p}_j = -i\boldsymbol{\nabla}_j.\end{aligned} \tag{2.5}$$

Для поперечної хвилі

$$\sum_\mu e^\mu Q_\mu(-\boldsymbol{q}) = -\frac{e}{c}\sum_\mu e^\mu v_\mu(\boldsymbol{q}). \tag{2.6}$$

Перейшовши до матричних елементів швидкостей, матимемо

$$\begin{aligned}\langle\alpha'|\chi_{\mu\nu}|\alpha\rangle = &-\frac{e^2}{m\omega_2^2}\frac{1}{V}\langle\alpha'|N(\boldsymbol{q}_1-\boldsymbol{q}_2)|\alpha\rangle\delta_{\mu\nu}-\frac{e^2}{\omega_2^2}\frac{1}{V}\\ &\times\sum_{\alpha''}\Big[\frac{\langle\alpha'|v_\mu(\boldsymbol{q}_2)|\alpha''\rangle\langle\alpha''|v_\nu(-\boldsymbol{q}_1)|\alpha\rangle}{E_\alpha-E_{\alpha''}+\omega_1}-\frac{\langle\alpha'|v_\nu(-\boldsymbol{q}_1)|\alpha''\rangle\langle\alpha''|v_\mu(\boldsymbol{q}_2)|\alpha\rangle}{E_{\alpha''}-E_\alpha+\omega_2}\Big].\end{aligned} \tag{2.7}$$

Цей вираз є вихідним при розгляді на основі різних підходів електронного КР світла (див. [3,15]). Як видно з цього виразу, постає проблема розрахунку власних станів та власних енерґій системи.

Другий доданок у формулі (2.7) можна переписати через матричні елементи оператора

$$\Pi^{\mu\nu}_{\boldsymbol{q}_2,-\boldsymbol{q}_1}(\omega_1,t) = -\int\limits_{-\infty}^{+\infty} ds\, e^{i\omega_1(t-s)}\{\{v_\mu(\boldsymbol{q}_2,t)|v_\nu(-\boldsymbol{q}_1,s)\}\},$$

$$v_\nu(-\boldsymbol{q}_1,s) = e^{iHs}v_\nu(-\boldsymbol{q}_1)e^{-iHs}. \tag{2.8}$$

Тут символом $\{\{\ldots|\ldots\}\}$ позначено “неусереднену” функцію Ґріна, означену в такий спосіб [16, 17]:

$$\{\{A(t)|B(t')\}\} = -i\Theta(t-t')[A(t),B(t')]. \tag{2.9}$$

Рівняння руху для цієї функції мають вигляд

$$\begin{aligned}\omega_1\{\{A|B\}\}_{\omega_1\omega_2} &= \frac{1}{2\pi}[A,B]_{\omega_1-\omega_2} + \{\{[A,H]|B\}\}_{\omega_1\omega_2}\\ \omega_2\{\{A|B\}\}_{\omega_1\omega_2} &= \frac{1}{2\pi}[A,B]_{\omega_1-\omega_2} - \{\{A|[B,H]\}\}_{\omega_1\omega_2},\end{aligned} \tag{2.10}$$

де

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

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

Використавши інтеґральне зображення для функції Гевісайда $\Theta(s)$

$$\Theta(-s) = \frac{i}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{dx}{x+i\varepsilon}e^{isx}, \tag{2.11}$$

отримаємо

$$\langle\alpha'|\Pi^{\mu\nu}_{\boldsymbol{q}_2,-\boldsymbol{q}_1}(\omega_1,0)|\alpha\rangle = \sum_{\alpha''}\Big[\frac{\langle\alpha'|v_\mu(\boldsymbol{q}_2)|\alpha''\rangle\langle\alpha''|v_\nu(-\boldsymbol{q}_1)|\alpha\rangle}{E_{\alpha''}-E_\alpha-\omega_1-i\varepsilon} - \frac{\langle\alpha'|v_\nu(-\boldsymbol{q}_1)|\alpha''\rangle\langle\alpha''|v_\mu(\boldsymbol{q}_2)|\alpha\rangle}{E_{\alpha'}-E_{\alpha''}-\omega_1-i\varepsilon}\Big]. \tag{2.12}$$

Отже,

$$\langle\alpha'|\chi_{\mu\nu}|\alpha\rangle = -\frac{e^2}{m\omega_2^2}\frac{1}{V}\langle\alpha'|N(\boldsymbol{q}_1-\boldsymbol{q}_2)|\alpha\rangle\delta_{\mu\nu} + \frac{e^2}{\omega_2^2}\frac{1}{V}\langle\alpha'|\Pi^{\mu\nu}_{\boldsymbol{q}_2,-\boldsymbol{q}_1}(\omega_1,0)|\alpha\rangle, \tag{2.13}$$

при цьому враховано зв’язок між частотою розсіяного й падаючого світла: $\omega_1+E_\alpha=\omega_2+E_{\alpha'}$. Для електронів у кристалі структура виразу (2.13) зберігається, однак перший доданок при цьому перенормовується й набирає вигляду, що визначається законом дисперсії для зонної енерґії; цей член дає внесок у нерезонансне розсіяння (див. нижче). Другий доданок відіграє важливу роль при резонансному розсіянні. Перейдімо у виразі для оператора Π від “неусереднених” функцій Ґріна на операторах швидкостей до відповідних функцій на операторах координат $\boldsymbol{R}(\boldsymbol{q}) = \sum_j e^{-i\boldsymbol{q}\boldsymbol{r}_j}\boldsymbol{r}_j$. Використовуючи рівняння руху (2.10), матимемо

$$\{\{v_\mu(\boldsymbol{q}_2)|v_\nu(-\boldsymbol{q}_1)\}\}_{\omega_1'\omega_1} = -\frac{i}{2\pi}[v_\nu(-\boldsymbol{q}_1),R_\mu(\boldsymbol{q}_2)]_{\omega_1'-\omega_1} + \omega_1'\omega_1\{\{R_\mu(\boldsymbol{q}_2)|R_\nu(-\boldsymbol{q}_1)\}\}_{\omega_1'\omega_1} \tag{2.14}$$

($[\boldsymbol{R}(\boldsymbol{q}),H] = i\boldsymbol{v}(\boldsymbol{q})$ в межі $\boldsymbol{q}_2,\boldsymbol{q}_1\to 0$), і тоді

$$\Pi^{\mu\nu}_{\boldsymbol{q}_2,-\boldsymbol{q}_1}(\omega_1,t) = i[v_\nu(-\boldsymbol{q}_1),R_\mu(\boldsymbol{q}_2)]_t - 2\pi\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega_1' e^{i(\omega_1-\omega_1')t}\omega_1'\omega_1\{\{R_\mu(\boldsymbol{q}_2)|R_\nu(-\boldsymbol{q}_1)\}\}_{\omega_1'\omega_1}. \tag{2.15}$$

У межі $\boldsymbol{q}_2, \boldsymbol{q}_1 \to 0$, що відповідає дипольному наближенню,

$$[v_\nu(-\boldsymbol{q}_1), R_\mu(\boldsymbol{q}_2)] = -\frac{i}{m}\delta_{\nu\mu}N(-\boldsymbol{q}_1 + \boldsymbol{q}_2). \tag{2.16}$$

Розгляньмо “неусереднену” функцію Ґріна $\{\{R_\mu|R_\nu\}\}$, переписавши оператори R_μ, R_ν через оператори Габбарда, що діють на базисі власних станів гамільтоніяна системи $H = \sum_i \lambda_i X^{ii}$:

$$R_\mu(\boldsymbol{q}_2) = \sum_{ik}\langle i|R_\mu(\boldsymbol{q}_2)|k\rangle X^{ik}. \tag{2.17}$$

Використовуючи рівняння руху, можемо отримати

$$\{\{X^{ik}|X^{lm}\}\}_{\omega_1'\omega_1} = \frac{1}{2\pi}\frac{[X^{ik}, X^{lm}]_{\omega_1'-\omega_1}}{\omega_1' - \lambda_{ki}}. \tag{2.18}$$

Урахувавши гайзенберґівське зображення для операторів Габбарда $X^{ik}(t) = e^{i\lambda_{ik}t}X^{ik}$, запишемо для комутатора:

$$[X^{ik}, X^{lm}]_{\omega_1'-\omega_1} = \delta_{kl}\delta(\omega_1' - \omega_1 + \lambda_{im})X^{im} \\ -\delta_{mi}\delta(\omega_1' - \omega_1 + \lambda_{lk})X^{lk}. \tag{2.19}$$

У результаті

$$\{\{R_\mu(\boldsymbol{q}_2)|R_\nu(-\boldsymbol{q}_1)\}\}_{\omega_1'\omega_1} = \frac{1}{2\pi}\sum_{ik}\sum_{lm}\langle i|R_\mu(\boldsymbol{q}_2)|k\rangle\langle l|R_\nu(-\boldsymbol{q}_1)|m\rangle\frac{[X^{ik}, X^{lm}]_{\omega_1'-\omega_1}}{\omega_1' - \lambda_{ki}}. \tag{2.20}$$

Інтеґрування за частотою ω_1' у виразі (2.15) зніметься завдяки δ-функціям, і ми прийдемо до виразу:

$$\Pi^{\mu\nu}_{\boldsymbol{q}_2,-\boldsymbol{q}_1}(\omega_1, t) = \frac{1}{m}\delta_{\mu\nu}N(-\boldsymbol{q}_1 + \boldsymbol{q}_2)_t - \omega_1\omega_2\sum_{imk}\Big(\frac{\langle i|R_\mu(\boldsymbol{q}_2)|k\rangle\langle k|R_\nu(-\boldsymbol{q}_1)|m\rangle}{\omega_1 - \lambda_{km}} \\ - \frac{\langle i|R_\nu(-\boldsymbol{q}_1)|k\rangle\langle k|R_\mu(\boldsymbol{q}_2)|m\rangle}{\omega_1 - \lambda_{ik}}\Big)X^{im}(t), \tag{2.21}$$

де враховано умову $\omega_1 + \lambda_m = \omega_2 + \lambda_i$. Увівши, згідно з означенням,

$$2\pi\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega_1' e^{i(\omega_1 - \omega_1')t}\{\{R_\mu(\boldsymbol{q}_2)|R_\nu(-\boldsymbol{q}_1)\}\}_{\omega_1'\omega_1} \equiv -\frac{1}{e^2}P^{\mu\nu}_{\boldsymbol{q}_2,-\boldsymbol{q}_1}(\omega_1, t), \tag{2.22}$$

оператор $P^{\mu\nu}_{\boldsymbol{q}_2,-\boldsymbol{q}_1}$, можемо записати

$$\Pi^{\mu\nu}_{\boldsymbol{q}_2,-\boldsymbol{q}_1}(\omega_1, t) = \frac{1}{m}\delta_{\mu\nu}N(-\boldsymbol{q}_1 + \boldsymbol{q}_2)|_t + \frac{\omega_1\omega_2}{e^2}P^{\mu\nu}_{\boldsymbol{q}_2,-\boldsymbol{q}_1}(\omega_1, t). \tag{2.23}$$

У результаті матимемо

$$\langle\alpha'|\chi^{\mu\nu}|\alpha\rangle = \frac{\omega_1}{\omega_2 V}\langle\alpha'|P^{\mu\nu}_{\boldsymbol{q}_2,-\boldsymbol{q}_1}(\omega_1, 0)|\alpha\rangle, \quad \chi^{\mu\nu}(t) = \frac{\omega_1}{\omega_2 V}P^{\mu\nu}_{\boldsymbol{q}_2,-\boldsymbol{q}_1}(\omega_1, t). \tag{2.24}$$

Отже, у межі $\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2 \to 0$ оператор поляризованости виражається через інтеґрал за частотою від “неусередненої” функції Ґріна, побудованої на фур'є-образах електронних дипольних моментів $e\boldsymbol{R}(\boldsymbol{q})$.

З наведених вище формул видно, що можуть бути два альтернативні підходи для розрахунку оператора поляризованости. Перший підхід (при використанні співвідношення (2.13)) є загальнішим і може використовуватися при описі розсіяння з $\boldsymbol{q} \neq 0$ (це, зокрема, рентґенівський діяпазон хвиль). Другий, оскільки формула (2.24) справедлива при $\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2 \to 0$, є придатним при розгляді КР світла і зручним при побудові явного вигляду оператора поляризованости шляхом операторних розкладів.

Для диференціяльного перерізу розсіяння в цьому другому підході звичайно записується такий вираз (див. [18], а також [13, 16, 19]):

$$\frac{\partial^2\sigma}{\partial\Omega\partial\omega_2} = \frac{\omega_2^3\omega_1}{c^4}\frac{n_2}{n_1}\sum_{\alpha\beta\alpha'\beta'} e_{1\alpha}e_{2\beta}e_{1\alpha'}e_{2\beta'}H^{\beta'\alpha',\beta\alpha}_{\boldsymbol{q}_2,\boldsymbol{q}_1}(\omega_1, \omega_2), \tag{2.25}$$

де тензор розсіяння має вигляд

$$H^{\beta'\alpha',\beta\alpha}_{\boldsymbol{q}_2,\boldsymbol{q}_1}(\omega_1, \omega_2) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} dt\, e^{i(\omega_1 - \omega_2)t}\langle P^{\beta'\alpha'}_{-\boldsymbol{q}_2,\boldsymbol{q}_1}(-\omega_1, t)P^{\beta\alpha}_{\boldsymbol{q}_2,-\boldsymbol{q}_1}(\omega_1, 0)\rangle. \tag{2.26}$$

III. НАБЛИЖЕННЯ СИЛЬНО ЗВ'ЯЗАНИХ ЕЛЕКТРОНІВ

Розгляньмо електронне КР для сильно зв'язаних електронів, що описуються локалізованими функціями (наближення сильного зв'язку). Увівши одночастинковий базис для електронів $|n\rangle \equiv \phi_n(\boldsymbol{r})$ (ортогоналізовані орбітально невироджені атомні функції), можемо записати у зображенні вторинного квантування гамільтоніян невзаємодіючих електронів:

$$H_0 = E_0 \sum_n a_n^+ a_n + \sum_{nm} t_{nm} a_n^+ a_m, \tag{3.27}$$

t_{nm} — інтеґрал перескоку. Перейшовши до $\boldsymbol{k}-$ простору

$$a_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{R}_n} \alpha_{\boldsymbol{k}}, \tag{3.28}$$

отримаємо

$$H_0 = \sum_k (E_0 + t(\boldsymbol{k})) \alpha_{\boldsymbol{k}}^+ \alpha_{\boldsymbol{k}} \equiv \sum_k \epsilon_{\boldsymbol{k}} \alpha_{\boldsymbol{k}}^+ \alpha_{\boldsymbol{k}}. \tag{3.29}$$

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

$$\boldsymbol{R}(\boldsymbol{q}) = \sum_{nn'm} \langle n|e^{-i\boldsymbol{q}\boldsymbol{r}}|m\rangle \langle m|\boldsymbol{r}|n'\rangle a_n^+ a_{n'}, \tag{3.30}$$

урахувавши

$$\langle n|e^{-i\boldsymbol{q}\boldsymbol{r}}|m\rangle \approx \delta_{mn} e^{-i\boldsymbol{q}\boldsymbol{R}_m}; \quad \langle m|\boldsymbol{r}|n'\rangle \approx \delta_{mn'} \boldsymbol{R}_m, \tag{3.31}$$

матимемо

$$\boldsymbol{R}(\boldsymbol{q}) = \sum_n e^{-i\boldsymbol{q}\boldsymbol{R}_n} \boldsymbol{R}_n a_n^+ a_n. \tag{3.32}$$

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

$$\langle m| - i\nabla|n'\rangle = \frac{m}{i}(\boldsymbol{R}_m - \boldsymbol{R}'_n) t_{mn'} \tag{3.33}$$

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

$$P_\alpha(\boldsymbol{q}) = m \sum_k \frac{\partial \epsilon_{\boldsymbol{k}}}{\partial k_\alpha} \alpha_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}/2}^+ \alpha_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}/2}. \tag{3.34}$$

Видно, що в цьому наближенні

$$\begin{aligned} &[\boldsymbol{R}(\boldsymbol{q}), H_0] = \frac{i}{m} \boldsymbol{P}(\boldsymbol{q}) = i\boldsymbol{v}(\boldsymbol{q}) \\ &[P_\alpha(\boldsymbol{q}_1), R_\beta(\boldsymbol{q}_2)] \\ &= -im \sum_k \frac{\partial^2 \epsilon_{\boldsymbol{k}}}{\partial k_\alpha \partial k_\beta} \alpha_{\boldsymbol{k}-\frac{\boldsymbol{q}_1+\boldsymbol{q}_2}{2}}^+ \alpha_{\boldsymbol{k}+\frac{\boldsymbol{q}_1+\boldsymbol{q}_2}{2}}. \end{aligned} \tag{3.35}$$

Наведені тут результати є справедливими і для міжелектронної взаємодії.

У прийнятому наближенні можемо переписати (2.14) у вигляді

$$\{\{R_\mu(\boldsymbol{q}_2)|R_\nu(-\boldsymbol{q}_1)\}\}_{\omega_1'\omega_1} = \frac{1}{\omega_1'\omega_1} \{\{v_\mu(\boldsymbol{q}_2)|v_\nu(-\boldsymbol{q}_1)\}\}_{\omega_1'\omega_1} + \frac{1}{2\pi} \frac{1}{\omega_1'\omega_1} \gamma_{\nu\mu}(\boldsymbol{q}_2 - \boldsymbol{q}_1)|_{\omega_1{}' - \omega_1}, \tag{3.36}$$

де

$$\gamma_{\mu\nu}(\boldsymbol{q}_2 - \boldsymbol{q}_1) = \sum_k \frac{\partial^2 \varepsilon_{\boldsymbol{k}}}{\partial k_\nu \partial k_\mu} \alpha_{\boldsymbol{k}-\frac{\boldsymbol{q}_2-\boldsymbol{q}_1}{2}}^+ \alpha_{\boldsymbol{k}+\frac{\boldsymbol{q}_2-\boldsymbol{q}_1}{2}}. \tag{3.37}$$

Перейшовши до операторів $P(\omega, t)$ та $\Pi(\omega, t)$ (формули (2.22) та (2.8) відповідно), матимемо таке співвідношення:

$$\begin{aligned} P_{\boldsymbol{q}_2,-\boldsymbol{q}_1}^{\mu\nu}(\omega_1, t) &= -\frac{e^2}{\omega_1\omega_2} \gamma_{\mu\nu}(\boldsymbol{q}_2 - \boldsymbol{q}_1)|_t \\ &+ \frac{e^2}{\omega_1\omega_2} \Pi_{\boldsymbol{q}_2,-\boldsymbol{q}_1}^{\mu\nu}(\omega_1, t), \end{aligned} \tag{3.38}$$

причому тут інтеґрування за частотою ω_1' виконано за допомогою описаної вже процедури (див. формули (2.15)–(2.22)). У результаті оператор поляризованости набирає форми

$$\chi_{\mu\nu}(t) = -\frac{1}{V} \frac{e^2}{\omega_2^2} \gamma_{\mu\nu}(\boldsymbol{q}_2 - \boldsymbol{q}_1)|_t + \frac{1}{V} \frac{e^2}{\omega_2^2} \Pi_{\boldsymbol{q}_2,-\boldsymbol{q}_1}^{\mu\nu}(\omega_1, t). \tag{3.39}$$

Такий запис тензора χ використовують звичайно для опису електронного КР на зонних електронах у напівпровідниках та сильно скорельованих (Мотт–Габбардівських) системах [8, 11, 12]. Перший доданок у (3.39) дає внесок у нерезонансне розсіяння (при цьому тензор $\gamma_{\mu\nu}(\boldsymbol{q})$ є ефективною вершиною), другий — у резонансне розсіяння (ефективними вершинами є оператори швидкостей $v_\alpha(\boldsymbol{q})$), при змішаному розсіянні будуть наявні як вершини з $\gamma_{\mu\nu}(\boldsymbol{q})$, так і з $v_\alpha(\boldsymbol{q})$.

У довгохвильовому наближенні ($\boldsymbol{q} \to 0$) 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 (2.7) для тензора поляризованости (див. [3, 20]). У нашому підході такий результат дістаємо в підході 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 (2.12) проводимо лише по станах підпростору, на якому діє оператор енерґії однозонної моделі.

На основі отриманих результатів відзначимо таке. Можна розглядати два способи для знаходження оператора поляризованости. У першому підході треба користуватися співвідношенням (2.24), при цьому необхідно розраховувати "неусереднені" функції Ґріна, побудовані на операторах дипольного моменту. Використовуючи другий підхід, потрібно користуватися формулою (3.39), тоді відразу виділяються нерезонансні (перший доданок у формулі (3.39)) та резонансні (другий доданок у формулі (3.39)) внески в розсіяння. У першому підході резонансні та нерезонансні внески з'являться при розрахунку "неусереднених" функцій Ґріна, побудованих на операторах дипольного моменту. Ми показали, що в межі $\boldsymbol{q} \to 0$ ці два методи знаходження оператора поляризованости є еквівалентними.

Виразивши оператор поляризованости $\chi_{\mu\nu}$ через "неусереднені" функції Ґріна, можемо розвивати певні схеми його побудови, застосовуючи наближені способи розрахунку цих функцій. Далі на прикладі моделі Фалікова–Кімбала та псевдоспін-електронної моделі розглянемо два різні способи отримання оператора поляризованости. Один із них базується на розкладах за степенями електронного переносу (цей спосіб застосуємо для моделі Фалікова–Кімбала), інший — на певних розщепленнях у рівняннях руху для "неусереднених" функцій Ґріна (розглянемо випадок слабкої псевдоспін-електронної взаємодії в ПЕМ).

IV. ОПЕРАТОР ПОЛЯРИЗОВАНОСТИ ДЛЯ МОДЕЛІ ФАЛІКОВА–КІМБАЛА

Модель Фалікова–Кімбала є однією з найчастіше використовуваних і досліджуваних моделей у теорії сильноскорельованих електронних систем. Сферою її переважного застосування є переходи метал–діелектрик та стани зі змінною валентністю. Протягом останніх років виявлено, що ця модель описує, крім цього, переходи у стани з просторовою модуляцією густини, а також фазове розшарування [21, 22].

Модель ФК є аналітично точно розв'язуваною в межі безмежної вимірности простору в підході динамічного середнього поля (ДСП). У зв'язку з цим у межах моделі були недавно проведені [12] за допомогою методу ДСП розрахунки ефективного перерізу КР на основі представлення Шастрі і Шраймана [11] для оператора поляризованости, що відповідає формулі (3.39) цієї праці. Така схема дала змогу розглянути окремо внески різного типу — резонансні, нерезонасні та змішані. При цьому виникала потреба розрахувати багаточасові кореляційні функції, які визначали шляхом переходу до мацубарівського частотного представлення (де відповідні корелятори розраховувалися точно в межі $d \to \infty$) за допомогою процедури, яка вимагала узагальнення звичайної спектральної теореми для двочасових функцій Ґріна.

Водночас становить інтерес розвиток і наближених схем розрахунку перерізу КР для моделі ФК. Ми зупинимось тут на підході, що відповідає наближенню сильного зв'язку й базується на згаданому вже розкладі за степенями переносу t_{ij}. Зазначимо, що використання такого розкладу дало змогу відтворити [19] (у другому порядку за t_{ij} у виразі для оператора поляризованости) результати, як зрештою і сам механізм, для т.зв. двомагнонного розсіяння [23] у випадку моделі Габбарда при половинному заповненні, коли в ній існує антиферомагнетне впорядкування.

Гамільтоніян моделі ФК запишімо в стандартному вигляді [24]

$$
\begin{aligned}
H = & \sum_i (E_d d_i^+ d_i + E_f f_i^+ f_i) \\
& + U \sum_i d_i^+ d_i f_i^+ f_i + \sum_{ij} t_{ij} d_i^+ d_j,
\end{aligned} \tag{4.40}
$$

де індекси d і f стосуються, відповідно, рухомих та нерухомих частинок (електронів). Енерґії E_d і E_f відраховуємо від своїх хемічних потенціялів. Доцільно перейти від фермі-операторів до операторів Габбарда, увівши базис одновузлових станів $|n_{id}, n_{if}\rangle$ (де n_{id}, n_{if} — числа заповнення рухомих та нерухомих частинок відповідно)

$$
|i;1\rangle = |i;0,0\rangle; |i;2\rangle = |i;1,1\rangle;
$$

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

тоді

$$
\begin{aligned}
& d_i^+ = X_i^{41} + X_i^{23}; \quad f_i^+ = X_i^{31} - X_i^{24} \\
& d_i^+ d_i = X_i^{44} + X_i^{22}; \quad f_i^+ f_i = X_i^{33} + X_i^{22}.
\end{aligned} \tag{4.41}
$$

Гамільтоніян моделі ФК набере вигляду

$$
\begin{aligned}
H = & \sum_i (E_d X_i^{44} + E_f X_i^{33} + (E_d + E_f + U) X_i^{22}) \\
& + \sum_{ij} t_{ij} (X_i^{41} + X_i^{23})(X_j^{14} + X_j^{32}).
\end{aligned} \tag{4.42}
$$

Уведемо оператор електричного дипольного моменту, що стосується i-го вузла

$$
M_i^\alpha = R_i^\alpha [e X_i^{44} + q X_i^{33} + (e + q) X_i^{22}], \tag{4.43}
$$

де e і q — ефективні заряди рухомих та нерухомих частинок. У довгохвильовій межі $M^\alpha(\boldsymbol{q} = 0) = \sum_i M_i^\alpha$. Використовуючи для оператора поляризованости його зображення через оператор $P^{\mu\nu}$, побудований на операторах фур'є-образів дипольних моментів, матимемо

$$\chi_{\mu\nu}(t) = -\frac{2\pi\omega_1}{V\omega_2}\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega_1'\, e^{i(\omega_1-\omega_1')t}\{\{M_\mu(\boldsymbol{q}_2)|M_\nu(-\boldsymbol{q}_1)\}\}_{\omega_1'\omega_1}. \tag{4.44}$$

"Неусереднена" функція Ґріна $\{\{M_\mu|M_\nu\}\}$ виражається через функції, побудовані на діягональних X-операторах. Застосуймо схему отримання явних виразів для таких функцій, що ґрунтується на методі рівнянь руху (така схема була запропонована в [13]), обмежуючись у ланцюжку рівнянь членами не вище другого порядку за t_{ij}. Проілюструймо 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

$$\omega_1\{\{X_i^{44}|X_l^{44}\}\}_{\omega_1\omega_2} = \sum_j t_{ij}\{\{X_i^{41}(X_j^{14}+X_j^{32})|X_l^{44}\}\}_{\omega_1\omega_2} - \sum_j t_{ji}\{\{(X_j^{41}+X_j^{23})X_i^{14}|X_l^{44}\}\}_{\omega_1\omega_2}. \tag{4.45}$$

"Неусереднені" функції вищого порядку, що входять у це рівняння, можна шукати в лінійному наближенні за t_{ij}. Для першої з них після диференціювання за другим часовим арґументом маємо:

$$\omega_2\{\{X_i^{41}(X_j^{14}+X_j^{32})|X_l^{44}\}\}_{\omega_1\omega_2} = \frac{\Big\{\delta_{jl}X_i^{41}X_j^{14} - \delta_{il}X_i^{41}(X_j^{14}+X_j^{32})\Big\}_{\omega_1-\omega_2}}{2\pi}$$
$$-\sum_m t_{lm}\{\{X_i^{41}(X_j^{14}+X_j^{32})|X_l^{41}(X_m^{14}+X_m^{32})\}\}_{\omega_1\omega_2} + \sum_m t_{ml}\{\{X_i^{41}(X_j^{14}+X_j^{32})|(X_m^{41}+X_m^{23})X_l^{14}\}\}_{\omega_1\omega_2}. \tag{4.46}$$

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

$$\{\{X_i^{41}(X_j^{14}+X_j^{32})|X_l^{41}(X_m^{14}+X_m^{32})\}\}_{\omega_1\omega_2} = \frac{1}{2\pi}\Big(\frac{A_{ij}^{ml}}{\omega_1}+\frac{B_{ij}^{ml}}{\omega_1-U}\Big)$$
$$\{\{X_i^{41}(X_j^{14}+X_j^{32})|(X_m^{41}+X_m^{23})X_l^{14}\}\}_{\omega_1\omega_2} = \frac{1}{2\pi}\Big(\frac{C_{ij}^{ml}}{\omega_1}+\frac{D_{ij}^{ml}}{\omega_1-U}\Big), \tag{4.47}$$

де

$$A_{ij}^{ml} = [X_i^{41}(X_j^{11}+X_j^{44})(X_m^{14}+X_m^{32})\delta_{jl} - X_l^{41}(X_i^{11}+X_i^{44})X_j^{14}\delta_{im}]_{\omega_1-\omega_2}$$
$$B_{ij}^{ml} = -[X_l^{41}(X_m^{11}+X_m^{44})X_j^{32}\delta_{im}]_{\omega_1-\omega_2} \tag{4.48}$$

$$C_{ij}^{ml} = [X_i^{41}(X_j^{11}+X_j^{44})X_l^{14}\delta_{jm} - (X_m^{41}+X_m^{23})(X_i^{11}+X_i^{44})X_j^{14}\delta_{il}]_{\omega_1-\omega_2}$$

$$D_{ij}^{ml} = [X_i^{41}(X_j^{22}+X_j^{33})X_l^{14}\delta_{jm} - (X_m^{41}+X_m^{23})(X_i^{11}+X_i^{44})X_j^{32}\delta_{il}]_{\omega_1-\omega_2}. \tag{4.49}$$

Аналогічно визначається друга функція вищого порядку $\{\{(X_j^{41}+X_j^{23})X_i^{14}|X_l^{44}\}\}_{\omega_1\omega_2}$ у формулі (4.45). У результаті отримуємо

$$\{\{X_i^{44}|X_l^{44}\}\}_{\omega_1\omega_2} = \frac{1}{2\pi\omega_1\omega_2}\sum_j t_{ij}\{\delta_{jl}X_i^{41}X_j^{14} - \delta_{il}X_i^{41}(X_j^{14}+X_j^{32})\}_{\omega_1-\omega_2}$$
$$-\frac{1}{2\pi\omega_1\omega_2}\sum_j t_{ij}\sum_m t_{lm}\Big(\frac{A_{ij}^{ml}}{\omega_1}+\frac{B_{ij}^{ml}}{\omega_1-U}\Big)$$
$$+\frac{1}{2\pi\omega_1\omega_2}\sum_j t_{ij}\sum_m t_{ml}\Big(\frac{C_{ij}^{ml}}{\omega_1}+\frac{D_{ij}^{ml}}{\omega_1-U}\Big)$$
$$-\frac{1}{2\pi\omega_1\omega_2}\sum_j t_{ij}(\delta_{il}(X_j^{41}+X_j^{23})X_i^{14} - \delta_{jl}X_j^{41}X_i^{14})_{\omega_1-\omega_2}$$
$$+\frac{1}{2\pi\omega_1\omega_2}\sum_j t_{ij}\sum_m t_{lm}\Big(\frac{A_{ji}^{ml}}{\omega_1}+\frac{K_{ji}^{lm}}{\omega_1+U}\Big)$$
$$-\frac{1}{2\pi\omega_1\omega_2}\sum_j t_{ij}\sum_m t_{ml}\Big(\frac{C_{ji}^{ml}}{\omega_1}+\frac{L_{ji}^{ml}}{\omega_1+U}\Big). \tag{4.50}$$

Тут

$$K_{ji}^{lm} = [X_j^{23}(X_i^{11}+X_i^{44})(X_m^{14}+X_m^{32})\delta_{il} - X_l^{41}(X_j^{22}+X_j^{33})X_i^{14}\delta_{jm}]_{\omega_1-\omega_2}$$

$$L_{ji}^{ml} = [X_j^{23}(X_i^{11}+X_i^{44})X_l^{14}\delta_{im}]_{\omega_1-\omega_2}. \tag{4.51}$$

Подібно розраховуємо інші функції виду $\{\{X_i^{pp}|X_l^{qq}\}\}$. Остаточний результат розрахунку зводиться до такого вигляду (де виділено складові першого та другого порядків щодо t_{ij}):

$$\{\{M_\mu(\boldsymbol{q}_2)|M_\nu(-\boldsymbol{q}_1)\}\}_{\omega_1\omega_2}|_{\boldsymbol{q}_2\to 0,\boldsymbol{q}_1\to 0} \equiv \{\{M_\mu|M_\nu\}\}_{\omega_1\omega_2}$$
$$= \{\{M_\mu|M_\nu\}\}^{(1)}_{\omega_1\omega_2} + \{\{M_\mu|M_\nu\}\}^{(2)}_{\omega_1\omega_2}; \tag{4.52}$$

$$\{\{M_\mu|M_\nu\}\}^{(1)}_{\omega_1\omega_2} = \frac{e^2}{2\pi\omega_1\omega_2}\sum_{k}\frac{\partial^2 t_{\boldsymbol{k}}}{\partial k^\mu \partial k^\nu}[d^+_{\boldsymbol{k}} d_{\boldsymbol{k}}]_{\omega_1-\omega_2}, \tag{4.53}$$

$$\{\{M_\mu|M_\nu\}\}^{(2)}_{\omega_1\omega_2} = -\frac{e^2}{2\pi\omega_1\omega_2}\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{k_1k_2}\frac{\partial t_{\boldsymbol{k}_1}}{\partial k_1^\mu}\frac{\partial t_{\boldsymbol{k}_2}}{\partial k_2^\nu}$$
$$\times\{[(1-w)_{\boldsymbol{k}_1+\boldsymbol{k}_2}(\frac{1}{\omega_1}X^{41}_{-\boldsymbol{k}_1}+\frac{1}{\omega_1+U}X^{23}_{-\boldsymbol{k}_1})d_{-\boldsymbol{k}_2}$$
$$+w_{\boldsymbol{k}_1+\boldsymbol{k}_2}(\frac{1}{\omega_1-U}X^{41}_{-\boldsymbol{k}_1}+\frac{1}{\omega_1}X^{23}_{-\boldsymbol{k}_1})d_{-\boldsymbol{k}_2}]_{\omega_1-\omega_2}$$
$$-[(1-w)_{\boldsymbol{k}_1+\boldsymbol{k}_2}d^+_{\boldsymbol{k}_2}(\frac{1}{\omega_1}X^{14}_{-\boldsymbol{k}_1}+\frac{1}{\omega_1-U}X^{32}_{-\boldsymbol{k}_1})$$
$$+w_{\boldsymbol{k}_1+\boldsymbol{k}_2}d^+_{\boldsymbol{k}_2}(\frac{1}{\omega_1+U}X^{14}_{-\boldsymbol{k}_1}+\frac{1}{\omega_1}X^{32}_{-\boldsymbol{k}_1})]_{\omega_1-\omega_2}\}, \tag{4.54}$$

тут уведено позначення для числа заповнення нерухомих частинок $w_i \equiv n_{if} = f_i^+ f_i$ та застосовано перетворення типу (3.28). Як видно, доданок (4.53) відповідає нерезонансній складовій тензора розсіяння (див. (3.39)). Тому можна зробити висновок, що в поправці другого порядку $\{\{M_\mu|M_\nu\}\}^{(2)}$ містяться внески найнижчого порядку за t від резонансної компоненти. Роль вершини тут відіграють похідні $\partial t_{\boldsymbol{k}}/\partial k^\alpha \equiv \partial\epsilon_{\boldsymbol{k}}/\partial k^\alpha$.

Як було показано в статті [12] при дослідженні резонансного комбінаційного розсіяння світла в моделі ФК, можливим є наростання інтенсивности розсіяння при частоті падаючого світла, близькій до величини енерґії взаємодії U. Як видно з формули (4.54), у нашому підході у виразі для оператора поляризованости з'являються доданки, які теж приведуть до резонансного наростання інтенсивности при частоті світла, близькій за енерґією фотона до величини U.

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

$$\{\{M_\mu|M_\nu\}\}_{\omega_1\omega_2} = \sum_s F_s^{\mu\nu}(\omega_1,\omega_2)Q_s(\omega_1-\omega_2). \tag{4.55}$$

Тензор розсіяння у цьому випадку матиме вигляд:

$$H^{\mu\nu,\alpha\beta}(\omega_1,\omega_2)=(2\pi)^2\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\sum_s\sum_r F_s^{\mu\nu}(-\omega_2,-\omega_1)F_r^{\alpha\beta}(\omega_2',\omega_1)\langle Q_s(-\omega_2+\omega_1)Q_r(\omega_2'-\omega_1)\rangle\,d\omega_2'. \tag{4.56}$$

Перейшовши до гайзенберґівського зображення для операторів

$$\langle Q_s(-\omega_2+\omega_1)Q_r(\omega_2'-\omega_1)\rangle = \frac{1}{2\pi}\delta(\omega_2'-\omega_2)\int_{-\infty}^{+\infty}dt\,e^{i(\omega_1-\omega_2)t}\langle Q_s(t)Q_r(0)\rangle, \tag{4.57}$$

матимемо

$$H^{\mu\nu,\alpha\beta}(\omega_1,\omega_2) = 2\pi\sum_{sr}F_s^{\mu\nu}(-\omega_2,-\omega_1)F_r^{\alpha\beta}(\omega_2,\omega_1)\int_{-\infty}^{+\infty}dt\,e^{i(\omega_1-\omega_2)t}\langle Q_s(t)Q_r(0)\rangle. \tag{4.58}$$

Отже, переріз КР розпадається в цьому випадку на ряд парціяльних внесків, пов'язаних із процесами розсіяння різних порядків за степенями параметра переносу t_{ij}. Слід підкреслити, що в межах 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.

V. ОПЕРАТОР ПОЛЯРИЗОВАНОСТИ ДЛЯ ПЕМ: ВИПАДОК СЛАБКОЇ ПСЕВДОСПІН-ЕЛЕКТРОННОЇ ВЗАЄМОДІЇ

ПЕМ з тунельним розщепленням рівнів, яке є певним узагальненням моделі ФК, використовуємо у випадку, коли в системі наявні локально-ангармонічні елементи структури. Прикладом такої ситуації можуть бути високотемпературні надпровідники типу YBaCuO (де відбуваються локальні ангармонічні коливання апексного кисню в напрямку по нормалі до площин CuO), а також кристали з водневими зв'язками. Для їх опису у випадку локального потенціялу з двома мінімумами застосовують псевдоспіновий формалізм. У результаті гамільтоніян ПЕМ має вигляд:

$$H = \sum_i(Un_{i,\uparrow}n_{i,\downarrow} - \mu(n_{i,\uparrow}+n_{i,\downarrow}) + gS_i^z(n_{i,\uparrow}+n_{i,\downarrow})$$
$$- hS_i^z + \Omega S_i^x) + \sum_{i,j,\sigma}t_{ij}c^\dagger_{i,\sigma}c_{j,\sigma}. \tag{5.59}$$

Електронну підсистему в цій моделі описуємо гамільтоніяном Габбарда (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 потенціялу [25–27].

Гамільтоніян ПЕМ є подібним до гамільтоніяна згадуваної вже моделі Фалікова–Кімбала. Модель ФК не містить доданка, який у ПЕМ відповідає за тунельне розщеплення рівнів (ПЕМ враховує перескоки т. зв. нерухомих частинок з одного мінімуму локального двоямного потенціялу в інший); крім цього, для моделі ФК, як правило, використовують режим постійної концентрації нерухомих частинок (це відповідає в ПЕМ фіксації середнього числа псевдоспіну), тоді як у ПЕМ використовують режими фіксації хемпотенціялу або концентрації рухомих частинок (електронів).

Дослідження ПЕМ були присвячені аналізу електронного спектра, вивченню поведінки діелектричної сприйнятливости, виявленню фазових переходів та виникненню фазового розшарування [28–32]. Як уже було згадано у вступі, у працях [13, 14] вивчено комбінаційне розсіяння світла в псевдоспін-електронній моделі для сильних псевдоспін-електронної та одновузлової електронної взаємодій.

Розгляньмо слабкий зв'язок у псевдоспін-електронній моделі ($U = 0$, $g < W$, W — півширина електронної зони, яка в цьому разі не розщеплюється). Електронний спектр та термодинаміка ПЕМ для цього випадку були досліджені в [32]. Щоб знайти оператор поляризованости, використаймо підхід, що базується на розщепленні рівнянь руху для "неусереднених" функцій Ґріна. Розщеплення рівнянь руху буде зроблено за аналогією до відомої методики розщеплень для звичайних усереднених функцій Ґріна. У статтях [13, 14] розглянуто шарувату квазідвовимірну кристалічну структуру типу YBaCuO з переносом електронів лише в площинах та з урахуванням різних компонент поляризації — "поперечної" та "поздовжньої" (щодо CuO). Для "поперечної" компоненти $eR^z \equiv d_e = \text{const}$, тоді дипольний момент комірки містить електронну та псевдоспінову складові

$$M_n^z = d_e \sum_\sigma a_{n\sigma}^+ a_{n\sigma} + d_s S_n^z. \tag{5.60}$$

В операторі поляризованости з'являться, отже, електронні, псевдоспінові та змішані внески. Розгляньмо спершу електронні внески.

У $\boldsymbol{q}$-зображенні електронну складову запишемо так:

$$M^z(\boldsymbol{q}) = d_e \sum_{\boldsymbol{k}\sigma} \alpha_{\boldsymbol{k}\sigma}^+ \alpha_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q},\sigma}. \tag{5.61}$$

Щоб побудувати оператор поляризованости в явному вигляді, необхідно розрахувати функцію Ґріна виду $\{\{\alpha_{\boldsymbol{k}_1\sigma}^+ \alpha_{\boldsymbol{k}_2\sigma} | \alpha_{\boldsymbol{k}_3\sigma'}^+ \alpha_{\boldsymbol{k}_4\sigma'}\}\}$. Для слабкого псевдоспін-електронного зв'язку доцільно розділити гамільтоніян на основну частину та на збурення [32]

$$\begin{aligned}
&H = H_0 + H_{\text{int}}, \\
&H_0 = -\lambda \sum_i \sigma_i^z - gNn\eta + \sum_{\boldsymbol{k}\sigma} \varepsilon_{\boldsymbol{k}} n_{\boldsymbol{k}\sigma}; \\
&\varepsilon_{\boldsymbol{k}} = g\eta - \mu + t_{\boldsymbol{k}}, \\
&H_{int} = g \sum_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'\sigma} \alpha_{\boldsymbol{k}\sigma}^+ \alpha_{\boldsymbol{k}'\sigma} \tilde{S}^z(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}') - ng \left(\sum_i S_i^z - N\eta \right),
\end{aligned} \tag{5.62}$$

де як гамільтоніян нульового наближення H_0 узято гамільтоніян середнього поля, який діягоналізується після перетворення повороту

$$\begin{aligned}
&S_i^z = \sigma_i^z \cos\theta + \sigma_i^x \sin\theta \\
&S_i^x = \sigma_i^x \cos\theta - \sigma_i^x \sin\theta \\
&\sin\theta = \Omega/\lambda;\ \lambda = \sqrt{(gn-h)^2 + \Omega^2}.
\end{aligned} \tag{5.63}$$

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

$$\tilde{S}^z(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}') = S^z(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}') - \eta\delta(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}'). \tag{5.64}$$

Виходячи з рівнянь руху (2.10) для "неусереднених" функцій Ґріна, матимемо:

$$\begin{aligned}
\{\{\alpha_{\boldsymbol{k}_1\sigma}^+ \alpha_{\boldsymbol{k}_2\sigma} | \alpha_{\boldsymbol{k}_3\sigma'}^+ \alpha_{\boldsymbol{k}_4\sigma'}\}\}_{\omega_1\omega_2} &= \frac{1}{2\pi} \frac{[\alpha_{\boldsymbol{k}_1\sigma}^+ \alpha_{\boldsymbol{k}_2\sigma}, \alpha_{\boldsymbol{k}_3\sigma'}^+ \alpha_{\boldsymbol{k}_4\sigma'}]_{\omega_1-\omega_2}}{\omega_1 - \epsilon_{\boldsymbol{k}_2} + \epsilon_{\boldsymbol{k}_1}} \\
&+ \frac{g}{\omega_1 - \epsilon_{\boldsymbol{k}_2} + \epsilon_{\boldsymbol{k}_1}} \sum_{\boldsymbol{k}'} \{\{\tilde{S}^z(\boldsymbol{k}_2 - \boldsymbol{k}') \alpha_{\boldsymbol{k}_1\sigma}^+ \alpha_{\boldsymbol{k}'\sigma} | \alpha_{\boldsymbol{k}_3\sigma'}^+ \alpha_{\boldsymbol{k}_4\sigma'}\}\}_{\omega_1\omega_2} \\
&- \frac{g}{\omega_1 - \epsilon_{\boldsymbol{k}_2} + \epsilon_{\boldsymbol{k}_1}} \sum_{\boldsymbol{k}'} \{\{\tilde{S}^z(\boldsymbol{k}' - \boldsymbol{k}_1) \alpha_{\boldsymbol{k}'\sigma}^+ \alpha_{\boldsymbol{k}_2\sigma} | \alpha_{\boldsymbol{k}_3\sigma'}^+ \alpha_{\boldsymbol{k}_4\sigma'}\}\}_{\omega_1\omega_2}.
\end{aligned} \tag{5.65}$$

Застосуймо процедуру "розщеплення" для апроксимації "неусередненої" функції Ґріна вищого порядку:

$$\begin{aligned}
&\{\{\tilde{S}^z(\boldsymbol{k}_2 - \boldsymbol{k}') \alpha_{\boldsymbol{k}_1\sigma}^+ \alpha_{\boldsymbol{k}'\sigma} | \alpha_{\boldsymbol{k}_3\sigma'}^+ \alpha_{\boldsymbol{k}_4\sigma'}\}\} \approx \\
&\langle \alpha_{\boldsymbol{k}_1\sigma}^+ \alpha_{\boldsymbol{k}'\sigma} \rangle \{\{\tilde{S}^z(\boldsymbol{k}_2 - \boldsymbol{k}') | \alpha_{\boldsymbol{k}_3\sigma'}^+ \alpha_{\boldsymbol{k}_4\sigma'}\}\}.
\end{aligned} \tag{5.66}$$

Усереднюючі обидві сторони в (5.66), ми отримаємо відоме наближення типу розщеплення для звичайних усереднених функцій Ґріна, яке було використане в [32] для розрахунку таких функцій (і яке для цього випадку збіглось із наближенням хаотичних фаз). У результаті нам треба знайти функцію $\{\{\tilde{S}|\alpha^+\alpha\}\}$, для якої знову записуємо рівняння руху. В результаті отримуємо

$$\{\{\tilde{S}^z(\boldsymbol{k}_2-\boldsymbol{k'})|\alpha^+_{\boldsymbol{k}_3\sigma'}\alpha_{\boldsymbol{k}_4\sigma'}\}\}_{\omega_1\omega_2}=\frac{g\lambda\sin^2\theta\langle\sigma^z\rangle_0}{\omega_1^2-\lambda^2}\frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{k}_5\sigma}\{\{\alpha^+_{\boldsymbol{k}_5+\boldsymbol{k'}-\boldsymbol{k}_2\sigma}\alpha_{\boldsymbol{k}_5\sigma}|\alpha^+_{\boldsymbol{k}_3\sigma'}\alpha_{\boldsymbol{k}_4\sigma'}\}\}_{\omega_1\omega_2}. \tag{5.67}$$

Уведемо позначення

$$\Sigma(\omega)=\sin^2\theta\frac{\lambda\langle\sigma^z\rangle_0}{\omega^2-\lambda^2};\ \Pi_{\boldsymbol{q}}(\omega)=\frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{k}}\frac{n_{\boldsymbol{k}}-n_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}}}{\omega+\epsilon_{\boldsymbol{k}}-\epsilon_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}}}. \tag{5.68}$$

Використовуючи (5.65) та (5.67), матимемо для “неусередненої” функції Ґріна, побудованої на електронній складовій оператора дипольного моменту M^z:

$$\{\{M^z(-\boldsymbol{q})|M^z(\boldsymbol{q'})\}\}_{\omega_1,\omega_2}=\frac{1}{2\pi}d_e^2\frac{1}{1-g^2\Sigma(\omega_1)\Pi_{\boldsymbol{q}}(\omega_1)}\frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{k}\sigma}\frac{[\alpha^+_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}\sigma}\alpha_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q'}\sigma}-\alpha^+_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}-\boldsymbol{q'}\sigma}\alpha_{\boldsymbol{k}\sigma}]_{\omega_1-\omega_2}}{\omega_1-\epsilon_{\boldsymbol{k}}+\epsilon_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}}. \tag{5.69}$$

Подібно можна розрахувати змішані та псевдоспінові внески в оператор поляризованости. Для “неусереднених” функцій Ґріна, що при цьому виникають, отримуємо:

$$d_s\{\{\tilde{S}^z(-\boldsymbol{q})|M^z(\boldsymbol{q'})\}\}_{\omega_1,\omega_2}=\frac{1}{2\pi}d_sd_e\frac{g\Sigma(\omega_1)}{1-g^2\Sigma(\omega_1)\Pi_{\boldsymbol{q}}(\omega_1)}\frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{k}\sigma}\frac{[\alpha^+_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}\sigma}\alpha_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q'}\sigma}-\alpha^+_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}-\boldsymbol{q'}\sigma}\alpha_{\boldsymbol{k}\sigma}]_{\omega_1-\omega_2}}{\omega_1-\epsilon_{\boldsymbol{k}}+\epsilon_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}}, \tag{5.70}$$

$$\begin{aligned}d_s^2\{\{\tilde{S}^z(-\boldsymbol{q})|\tilde{S}^z(\boldsymbol{q'})\}\}_{\omega_1,\omega_2}&=\frac{1}{2\pi}d_s^2\frac{\Sigma(\omega_1)}{\sin\theta\langle\sigma^z\rangle_0}\\ \times\frac{[\omega_1\sigma^z(\boldsymbol{q'}-\boldsymbol{q})\sin\theta-\omega_1\sigma^x(\boldsymbol{q'}-\boldsymbol{q})\cos\theta-\lambda i\sigma^y(\boldsymbol{q'}-\boldsymbol{q})\cos\theta]_{\omega_1-\omega_2}}{\omega_1(1-g^2\Sigma(\omega_1)\Pi_{\boldsymbol{q}}(\omega_1))}&,\end{aligned} \tag{5.71}$$

$$d_s\{\{M^z(-\boldsymbol{q})|\tilde{S}^z(\boldsymbol{q'})\}\}=d_ed_sg\Pi_{\boldsymbol{q}}(\omega_1)\{\{\tilde{S}^z(-\boldsymbol{q})|\tilde{S}^z(\boldsymbol{q'})\}\}. \tag{5.72}$$

Відзначимо, що вирази (5.70) і (5.72) мають різну структуру. Якщо б ми хотіли симетризувати вирази (5.70) і (5.72), то потрібно було б будувати рівняння руху, диференціюючи як за правим, так і за лівим арґументом. Зокрема, якщо б ми застосували описану вище схему, але диференціювали за правим арґументом, то, замість (5.71), ми б отримали

$$\begin{aligned}d_s^2\{\{\tilde{S}^z(-\boldsymbol{q})|\tilde{S}^z(\boldsymbol{q'})\}\}_{\omega_1,\omega_2}&=\frac{1}{2\pi}d_s^2\frac{\Sigma(\omega_2)}{\sin\theta\langle\sigma^z\rangle_0}\\ \times\frac{[\omega_2\sigma^z(\boldsymbol{q'}-\boldsymbol{q})\sin\theta-\omega_2\sigma^x(\boldsymbol{q'}-\boldsymbol{q})\cos\theta+\lambda i\sigma^y(\boldsymbol{q'}-\boldsymbol{q})\cos\theta]_{\omega_1-\omega_2}}{\omega_2(1-g^2\Sigma(\omega_2)\Pi_{\boldsymbol{q'}}(\omega_2))}&.\end{aligned} \tag{5.73}$$

Тензор КР виражається через двочасові функції Ґріна (що випливає з формули (2.26)):

$$\begin{aligned}&H^{\alpha\beta,\alpha'\beta'}_{q_2,q_1=0}(\omega_1,\omega_2)=\frac{-(2\pi)^2}{(e^{\beta\omega}-1)}\sum_{i,i_1,j,j_1}2\Im\langle\langle\{\{M_i^{\alpha'}|M_j^{\beta'}\}\}_{\omega_2,\omega_1}|\{\{M_{i_1}^{\alpha}|M_{j_1}^{\beta}\}\}_{-\omega_2,-\omega_1}\rangle\rangle_{\omega+i\varepsilon},\\&\omega=\omega_2-\omega_1.\end{aligned} \tag{5.74}$$

При розрахунку тензора розсіяння виникає потреба обчислити усереднені функції Ґріна типу $\langle\langle\sigma^x|\sigma^x\rangle\rangle$ і їй подібні. Такі функції знайдено у праці [32], там же досліджено поведінку їх уявних частин (як видно з формули (5.74), саме уявна частина функції Ґріна дає інформацію про спектр комбінаційного розсіяння).

Виявлено, що в системі наявні псевдоспін-хвильові збудження, що визначаються полюсами цих функцій (див. [32]). Коли ж електронна зона майже заповнена (подібна картина є і для майже пустої зони) і хемпотенціял задовольняє умову $\mu\lesssim W+g\eta$ $(T\to0)$, отримуємо наступний вираз для енерґії псевдоспінхвильових збуджень (при малих значеннях хвильового вектора q):

$$\omega_{ps}\approx\lambda+g^2\sin^2\theta\langle\sigma^z\rangle_0\frac{{k^*}^2tq^2}{2\pi\lambda^2}\ \ (\omega>2tk^*q+q^2t), \tag{5.75}$$

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

У частотних діяпазонах $\omega > 2tk^*q + q^2t$; $\omega < -2tk^*q + q^2t$ уявна частина $\Pi_q(\omega + i\varepsilon)$ дорівнює нулеві [32] і в спектрі розсіяння наявний лише $\delta-$ пік на частоті ω_{ps}. У ділянці $-2tk^*q + q^2t < \omega < 2tk^*q + q^2t$ уявна частина Π_q відмінна від нуля і з'являється смуга неперервного спектра, тобто наявні збудження, пов'язані з електронними переходами. Внесок останніх в інтенсивність розсіяння зникає в довгохвильовій межі, тому їх можна було б виявити в експериментах із розсіянням рентґенівських променів. Енерґія $\lambda = \sqrt{(gn-h)^2 + \Omega^2}$ залежить від концентрації електронів, і тому пік у спектрі комбінаційного розсіяння зсувається при зміні концентрації. Таку особливість відзначають на експерименті, досліджуючи КР світла в кристалах типу YBaCuO (ділянки спектра, пов'язані з коливаннями апексного кисню) [1, 2, 33].

VI. ВИСНОВКИ

Розглянуто два альтернативні підходи для знаходження оператора поляризовании при розрахунку диференціяльного перерізу комбінаційного розсіяння світла. Один із них полягає в зображенні оператора поляризовании через "неусереднені" функції Ґріна, побудовані на операторах дипольного моменту. В іншому підході явно виділяються резонансні та нерезонансні внески, причому резонансні внески пов'язані із "неусередненими" функціями Ґріна, побудованими на операторах швидкостей. Показано, що ці два підходи є еквівалентними в межі $\boldsymbol{q} \to 0$. У межах наближення сильного зв'язку (випадок сильно зв'язаних електронів) при виділенні одного орбітального стану на атомі (одної електронної зони) для нерезонансного внеску отримано вираз, у який входить тензор оберненої ефективної маси. У стандартних підходах такого типу нерезонансну складову отримують за рахунок перенормування, яке пов'язане із внесками від електронних переходів до інших зон.

Застосовано мікроскопічний підхід, щоб одержати аналітичний вираз оператора поляризовании, використовуючи рівняння руху для "неусереднених" функцій Ґріна. При цьому для моделі ФК при розв'язуванні цих рівнянь у ролі формального параметра розкладу використано константу електронного переносу, тоді як для ПЕМ при слабкій псевдоспін-електронній взаємодії та відсутности одновузлової електронної взаємодії застосовано процедуру розщеплення "неусереднених" функцій Ґріна вищих порядків.

Для слабкого псевдоспін-електронного зв'язку та за відсутности одновузлової взаємодії між електронами спектр КР складається із δ-піка, що відповідає псевдоспін-хвильовим збудженням. Як і для сильних псевдоспін-електронної та одновузлової електронної взаємодій у ПЕМ [13, 14], положення піка у спектрі розсіяння залежить від концентрації носіїв заряду. Цей результат узгоджується з експериментальними дослідженнями комбінаційного розсіяння в кристалах типу $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ (коливання апексного кисню) [1, 2, 33], де відзначається залежність позиції піка від ступеня леґування.

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

[1] L. Ulivi, M. Zoppi, Proc. 4th Eur. Ceram. Soc. Conf. **6**, 35 (1995).

[2] M. N. Iliev, V. G. Hadjiev, V. G. Ivanov, J. Raman Spectroscopy **27**, 333 (1996).

[3] S. L. Cooper. Electronic and Magnetic Raman Scattering Studies of the High-T_c Cuprates. In: *Handbook on the Physics and Chemistry of Rare Earths* (Elsevier Science, Amsterdam, 2001).

[4] C. Thomsen, G. Kaczmarczyk, Vibrational Raman Spectroscopy of High-temperature Superconductors. In: *Handbook of Vibrational Spectroscopy* (John Wiley & Sons Ltd, Chichester, 2002).

[5] 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* (Taylor & Francis Inc, London and New York, 2003).

[6] E. Faulques, V. G. Ivanov, Phys. Rev. B **55**, 3974 (1997).

[7] О. В. Мисочко, Е. Я. Шерман., ФТТ **40**, 27 (1998).

[8] J. K. Freericks, T. P. Devereaux, Phys. Rev. B **64**, 125110 (2001).

[9] T. P. Devereaux, G. E. D. McCormack, J. K. Freericks, Phys. Rev. B **68**, 075105 (2003).

[10] J. K. Freericks, T. P. Devereaux, R. Bulla, Th. Pruschke, Phys. Rev. B **67**, 155102 (2003).

[11] B. S. Shastry, B. I. Shraiman, Phys. Rev. Lett. **65**, 1068 (1990).

[12] A. M. Shvaika , O. Vorobyov, J. K. Freericks, T. P. Devereaux, Phys. Rev. Lett. **93**, 137402 (2004).

[13] I. V. Stasyuk, T. S. Mysakovych, J. Phys. Stud. **3**, 344 (1999).

[14] T. S. Mysakovych, I. V. Stasyuk, Condens. Matter Phys. **7**, 347 (2004).

[15] *Рассеяние света в твердых телах.* Под ред. М. Кардоны (Мир, Москва, 1979).

[16] И. В. Стасюк, Я. Л. Иванкив, препринт ITP-87-57P, Київ (1987).

[17] Ya. Ivankiv, Condens. Matter Phys. **2**, 523 (1999).

[18] R. Barrie, I. W. Sharpe, Can. J. Phys. **56**, 550 (1978).

[19] I. V. Stasyuk, T. S. Mysakovych, Condens. Matter Phys. **3**, 183 (2000).

[20] А. А. Абрикосов, В. М. Генкин, Журн. эксп. теор. физ. **65**, 842 (1973).

[21] U. Brandt, C. Mielsch, Z Phys. B **75**, 365 (1989).

[22] J. K. Freericks, Phys. Rev. B **48**, 14797 (1993).

[23] P. Fleury, R. Loudon, Phys. Rev. **166**, 514 (1968).

[24] L. M. Falicov, J. K. Kimball, Phys. Rev. Lett. **22**, 997 (1969).

[25] K. A. Müller, Z. Phys. B **80**, 193 (1990).
[26] J. E. Hirsch, S. Tang, Phys. Rev. B **40**, 2179 (1989).
[27] M. Frick, W. von der Linden, I. Morgenstern, H. Raedt, Z. Phys. B **81**, 327 (1990).
[28] I. V. Stasyuk, A. M. Shvaika, E. Schachinger, Physica C **213**, 57 (1993).
[29] I. V. Stasyuk, A. M. Shvaika, Condens. Matter Phys. **3**, 134 (1994).
[30] I. V. Stasyuk, O. D. Danyliv, Phys. Status Solidi B **219**, 299 (2000).
[31] I. V. Stasyuk, A. M. Shvaika, K. V. Tabunshchyk, Condens. Matter Phys. **2**, 109 (1999).
[32] I. V. Stasyuk, T. S. Mysakovych, Condens. Matter Phys. **5**, 473 (2002).
[33] D. Palles, N. Poulakis, E. Liarokapis, K. Conder, E. Kaldis, K. A. Müller, Phys. Rev. B **54**, 6721 (1996).

RAMAN SCATTERING IN STRONGLY CORELATED ELECTRON SYSTEMS. STRONG COUPLING APPROXIMATION

I. V. Stasyuk, T. S. Mysakovych
Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine,
1 Svientsitskii St., Lviv, UA-79011, Ukraine
E-mail (T.S.Mysakovych): mtaras@icmp.lviv.ua

The microscopic approach based on presentating the 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 the approach in which the so-called resonant and nonresonant contributions to scattering are explicitly separated is revealed. Contributions to the polarizability operator for the case of Falicov–Kimball model and pseudospin-electron model at weak pseudospin-electron interaction are analysed.