НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ІНСТИТУТ ФІЗИКИ КОНДЕНСОВАНИХ СИСТЕМ

ШВАЙКА Андрій Михайлович

УДК 538.9, 538.915, 544.225.23, 535.33, 535.36

БАГАТОЧАСТИНКОВА ДИНАМІКА ТА ЕФЕКТИ НЕПРУЖНОГО РОЗСІЯННЯ У СИЛЬНОСКОРЕЛЬОВАНИХ ЕЛЕКТРОННИХ СИСТЕМАХ

01.04.02 — теоретична фізика

Автореферат
дисертації на здобуття наукового ступеня
доктора фізико-математичних наук

Львів — 2011

Дисертацією є рукопис.

Робота виконана в Інституті фізики конденсованих систем Національної академії наук України

Науковий консультант: член-кореспондент НАН України, доктор фізико-математичних наук, професор **Стасюк Ігор Васильович**, завідувач відділу квантової статистики Інституту фізики конденсованих систем Національної академії наук України (м. Львів)

Офіційні опоненти: академік НАН України, доктор фізико-математичних наук, професор **Локтєв Вадим Михайлович**, завідувач відділу нелінійної фізики конденсованого стану Інституту теоретичної фізики імені М.М. Боголюбова НАН України (м. Київ)

доктор фізико-математичних наук, професор **Ткач Микола Васильович**, завідувач кафедри теоретичної фізики Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича (м. Чернівці)

доктор фізико-математичних наук, професор **Ваврух Маркіян Васильович**, завідувач кафедри астрофізики Львівського національного університету імені Івана Франка (м. Львів)

Захист відбудеться « 2 » березня 2011 р. о 15 год. 30 хв. на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 35.156.01 при Інституті фізики конденсованих систем Національної академії наук України за адресою:
79011, м. Львів, вул. Свєнціцького, 1.

З дисертацією можна ознайомитись у науковій бібліотеці Інституту фізики конденсованих систем Національної академії наук України за адресою:
79026, м. Львів, вул. Козельницька, 4.

Автореферат розісланий " 28 " січня 2011 р.

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

Актуальність теми. У сучасній фізиці конденсованих систем однією з центральних є проблема опису властивостей сильновзаємодіючих багатоелектронних систем. Багато незвичайних властивостей [напр. перехід метал-діелектрик, електронний (анти)феромагнетизм, фазове розшарування, і т.п.] систем з вузькими зонами провідності (перехідні метали та їхні сполуки, деякі органічні сполуки, високотемпературні надпровідники, і т.д.) можна пояснити тільки при правильному врахуванні сильних локальних електронних кореляцій. Серед моделей, які покликані враховувати електронні кореляції, найпростішою за формою є однозонна модель Хаббарда з одновузловим кулонівським відштовхуванням, а також її граничні випадки: $t-J$ модель, модель Фалікова-Кімбала, тощо. Інтенсивні дослідження моделей типу Хаббарда, які були в основному пов'язані з розробкою теорії високотемпературних надпровідників, висвітлили цілий ряд важливих особливостей цих моделей. Але до цього часу існує цілий ряд проблем, що потребують розв'язку, зокрема через відсутність послідовних строгих підходів для випадку проміжних та сильних значень електронних кореляцій. Такі підходи можна побудувати з використанням послідовної теорії збурень за електронним переносом на основі діаграмної техніки для операторів Хаббарда [Слободян П.М., Стасюк И.В. *ТМФ*, 1974, **19**, 423]. Складність таких підходів пов'язана, разом з тим, з поняттям "ієрархії" операторів Хаббарда, що сильно ускладнює побудову вищих наближень.

Значні досягнення останніх десятиліть в теорії сильноскорельованих електронних систем пов'язані з розробкою теорії динамічного середнього поля (ДСП) [Metzner W., Vollhardt D. *Phys. Rev. Lett.*, 1989, **62**, 324; Georges A., Kotliar G., Krauth W., Rozenberg M.J. *Rev. Mod. Phys.*, 1996, **68**, 13]. Теорія ДСП дає непертурбативний метод, який дозволяє спроектувати модель Хаббарда для ґратки на однодомішкову модель Андерсона, що є точною процедурою в границі нескінченої вимірності простору, коли власноенергетична частина функцій Гріна стає локальною. В рамках цієї теорії немає обмежень на величину кореляції і вона придатна при проміжних значень взаємодії, для яких отримано опис переходу метал-діелектрик та визначено області фермі-рідинної поведінки електронної підсистеми. Також, деякий клас моделей типу бінарного сплаву (напр. модель Фалікова-Кімбала) піддається аналітичному розгляду в рамках теорії ДСП [Freericks J.K., Zlatić V. *Rev. Mod. Phys.*, 2003, **75**, 1333]. Але розв'язок ефективної однодомішкової моделі Андерсона у випадку моделі Хаббарда набагато складніший і, як правило, використовуються прямі числові методи (напр. метод точної діагоналізації чи метод квантового Монте-Карло). Також теорія ДСП зустрічається зі значними трудношами при описі систем з корельованим переносом (нелокальними багаточастинковими взаємодіями), коли власноенергетична частина стає нелокальною [Schiller A. *Phys. Rev. B*, 1999, **60**, 15660]. Тому актуальною є розробка нових аналітичних підходів до розгляду ефективної одновузлової задачі в теорії ДСП.

Для практичних застосувань дуже важливо вміти розраховувати величини, які вимірюються на експерименті. У першу чергу це функції, які описують відгук багаточастинкової системи на зовнішній вплив, як лінійний: електро- та теплопровідність, оптична провідність, діелектрична сприйнятливість, — так і вищого порядку за зовнішнім збуренням: нелінійні сприйнятливості та перерізи непружного розсіяння світла та рентгенівських променів. Розв'язок одновузлової задачі теорії ДСП дає локальну власноенергетичну частину, а отже зондує тільки локальні властивості (від усіх хвильових векторів у зоні Брилюена) і не несе інформації про нестійкості з певним хвильовим вектором, напр., (анти)феромагнітне чи зарядове впорядкування, тощо, що зумовлює потребу в розрахунку сприйнятливостей. Відомо, що у підході слабкого зв'язку в границі $D \to \infty$ незвідні зарядові вершини у рівнянні Бете-Салпітера стають також локальними [Zlatić V., Horvatić B. *Sol. State Commun.*, 1990, **75**, 263]. Але, як правило, виконуються розрахунки тільки статичних сприйнятливостей для різних значень хвильових векторів, які не потребують проведення аналітичного продовження і можуть бути розраховані на мацубарівських частотах [Pruschke T., Cox D.L., Jarrell M. *Phys. Rev. B*, 1993, **47**, 3553; Freericks J.K. *Phys. Rev. B*, 1993, **47**, 9263], і практично відсутні дослідження динамічних сприйнятливостей. Проводилися розрахунки тільки спектрів оптичної та статичної провідності [Schweitzer H., Czycholl G. *Phys. Rev. Lett.*, 1991, **67**, 3724; Möller G., Ruckenstein A.E., Schmitt-Rink S. *Phys. Rev. B*, 1992, **46**, 7427], які у границі $D \to \infty$ визначаються однопетлевими внесками і не потребують розрахунку незвідних зарядових вершин. Інша складність на шляху теоретичного дослідження багаточастинкового відгуку зумовлена відсутністю спектральних співвідношень та зручних для практичного використання виразів, які пов'язують спостережуваний на експерименті багаточастинковий відгук з відповідними багаточасовими кореляційними функціями та функціями Гріна.

Одним з прикладів фізичних процесів, для опису яких слід залучати багаточасові кореляційні функції, є резонансне непружне (комбінаційне) розсіяння світла та рентгенівських променів. Електронне комбінаційне розсіяння світла вже давно використовується як прямий метод дослідження зарядових збуджень у різних сполуках і експерименти виявили цілий ряд цікавих явищ, особливо у сильноскорельованих системах [Devereaux T.P., Hackl R. *Rev. Mod. Phys.*, 2007, **79**, 175], зокрема, комбінаційне розсіяння володіє цілим рядом універсальних (не залежних від сполуки) властивостей у сильноскорельованих діелектричних матеріалах. Особливе зацікавлення викликають резонансні ефекти, оскільки вважається, що резонанс може призвести до підвищення нерезонансного відгуку на порядки і дозволить спостерігати слабкі сигнали. Але залишається невідомим, чи може таке резонансне посилення кардинально змінити форму основного нерезонансного відгуку, хоча добре відомо, що спектри комбінаційного розсіяння для багатьох сильноскорельованих металів і діелектриків проявляють складну залежність від частоти налітаючих фотонів, але причина більшості таких резонансів до цього часу неясна. Також нез'ясованими залишаються питання про те, як при резонансі змінюються як низькоенергетичні особливості спектру (такі як електрон-діркові збудження поблизу рівня Фермі), так і високоенергетичні (наприклад, збудження з переносом заряду). Більшість розрахунків виконуються для малих кластерів і на даний час не існує теорії комбінаційного розсіяння світла на електронних збудженнях, яка б передбачала профілі спектральних ліній при рівноправному врахуванні резонансних, змішаних і нерезонансних внесків і була б нечутлива до розмірних ефектів.

В останні роки відбувся значний прогрес у створенні інструментальної бази для проведення експериментів з резонансного непружного розсіяння рентгенівських променів. Особливий інтерес викликають можливості цього методу, як прямого засобу вимірювання енергії і імпульсу зарядових збуджень у складних матеріалах [Ament L.J.P., van Veenendaal M., Devereaux T. P., et al. *Rev. Mod. Phys.*, 2011 (in print)]. Теоретичний опис процесів взаємодії рентгенівського випромінення з електронною підсистемою сильноскорельованих матеріалів знаходиться у стані розробки. Відомо ще з класичних робіт Нозієра і де Домінісіса [Nozières P., De Dominicis C.T. *Phys. Rev.*, 1969, **178**, 1097], що спектр рентгенівської фотоелектронної емісії визначається пропагатором дірки йонного залишку і для металічних систем при нулю температури містить степеневу сингулярність крайового спектру поглинання, яка зникає для діелектрика, але відсутні теоретичні дослідження спектрів рентгенівського крайового поглинання для сильноскорельованих електронних систем при скінчених температурах. Розрахунки спектрів резонансного непружного розсіяння рентгенівських променів в основному виконуються для малих кластерів [Kotani A., Shin S. *Rev. Mod. Phys.*, 2001, **73**, 203], причому, як правило, при таких розрахунках пропагатор дірки йонного залишку заміняється пропагатором для локалізованого стану з певною енергією і ефективною півшириною (часом життя дірки) і не враховуються ефекти багаточастинкового розсіяння та динамічного екранування.

У зв'язку з вищесказаним актуальною залишається розробка аналітичних методів знаходження розв'язків одновузлової задачі теорії ДСП для проміжних та великих значень одновузлової кореляції, а також побудова теорії ДСП для систем з корельованим переносом. Інше важливе завдання теоретичного опису багаточастинкових процесів у сильноскорельованих електронних системах пов'язане з отриманням функцій динамічного відгуку, що включає цілий ряд задач, зокрема, отримання незвідних зарядових вершин, встановлення аналітичних властивостей багаточасових кореляційних функцій та функцій Гріна і, на цій основі, знаходження виразів для спостережуваних величин, напр., динамічних сприйнятливостей, спектрів фотоемісії чи поглинання та перерізів непружного розсіяння.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами. Дисертаційна робота виконана в Інституті фізики конденсованих систем НАН України, із науковою тематикою якого пов'язаний вибраний напрямок досліджень. Представлені у дисертації результати отримані згідно з планами робіт у рамках бюджетних тем НАН України "Дослідження ефектів зумовлених локальним ангармонізмом та короткодіючою взаємодією квантових полів різної природи в кристалічних, невпорядкованих і молекулярних системах" (1994-1998 рр., номер держреєстрації 0194U022986), "Термодинаміка та кінетика псевдоспін-ферміонних моделей локально-ангармонічних кристалічних і молекулярних систем з сильними хаббардівськими кореляціями" (1999-2001 рр., номер держреєстрації 0199U000670), "Дослідження колективних іонних та електрон-іонних процесів у твердих тілах на основі ферміонних граткових моделей" (2002-2004 рр., номер держреєстрації 0102U000217), "Розробка сучасних теоретичних методів та їх застосування до вивчення властивостей конденсованих систем" (2002-2006 рр., номер держреєстрації 0102U001794), "Розвиток аналітичних методів теорії енергетичного спектру та динаміки сильноскорельованих систем частинок" (2005-2007 рр., номер держреєстрації 0105U002085), "Розвиток і застосування методів аналітичної теорії та комп'ютерного експерименту для опису явищ переносу в іон-електронних системах" (2007-2011 рр., номер держреєстрації 0107U002081), "Моделювання фізичних властивостей квантових граткових систем з багаточастинковими кореляціями" (2008-2012 рр., номер держреєстрації 0108U001154), а також проекту Державного фонду фундаментальних досліджень "Іонний та електронний транспорт в іонних провідниках та матеріалах з вузькими електронними зонами провідності" (2001-2002 рр., номер держреєстрації 02.07/266).

Мета і завдання дослідження. *Метою дисертаційної роботи* є розвиток послідовного мікроскопічного опису багаточастинкової динаміки сильноскорельованих електронних систем у підході сильного зв'язку та теорії динамічного середнього поля і розробка на цій основі методів отримання та проведення розрахунків багаточастинкових сприйнятливостей та перерізів резонансного непружного (комбінаційного) розсіяння. Для досягнення даної мети у роботі необхідно було розв'язати наступні *завдання*:

1. Розробка методів сильного зв'язку для ефективної одновузлової задачі теорії ДСП та дослідження термодинаміки і багаточастинкового відгуку для моделей типу бінарного сплаву в теорії сильноскорельованих електронних систем.
2. Розвиток загального підходу сильного зв'язку до опису корельованого переносу (нелокальних багаточастинкових взаємодій) в теорії ДСП.
3. Дослідження аналітичних властивостей та отримання спектральних співвідношень для багаточасових кореляційних функцій; встановлення зв'язку між перерізами непружного розсіяння електромагнітних хвиль та багаточасовими кореляційними функціями.

4. Дослідження резонансних ефектів при комбінаційному розсіянні світла на електронних збудженнях.
5. Розробка методів опису динаміки локалізованих збуджень та отримання фотоемісійних спектрів рентгенівських променів; дослідження резонансного непружного розсіяння рентгенівських променів для сильноскорельованих електронних систем.

Об'єктом дослідження дисертаційної роботи є сильноскорельовані ферміонні системи, такі як електронні підсистеми у сполуках з перехідними та рідкісноземельними елементами. *Предмет дослідження* — вплив багаточастинкових взаємодій та кореляцій на динаміку і термодинаміку сильноскорельованих електронних систем та їх прояв у динамічному відгуку, фотоемісійних спектрах та резонансному непружному (комбінаційному) розсіянні світла і рентгенівських променів.

Методи дослідження. Для послідовного врахування одновузлових хаббардівських кореляцій використано теорію динамічного середнього поля. Розв'язання ефективної одновузлової задачі теорії ДСП виконано з використанням підходів сильного зв'язку (розклади за міжвузловим електронним переносом та теорема Віка для операторів Хаббарда). Самоузгодженість отриманих результатів забезпечувалася шляхом побудови термодинамічного потенціалу типу Бейма-Каданова та отриманням усіх величин з нього через функціональні похідні. Перерізи резонансного непружного розсіяння розраховувалися на основі багаточасових температурних функцій Гріна. Спектри локалізованих станів були розраховані з використанням дискретного методу Вінера-Гопфа.

Наукова новизна одержаних результатів. У рамках теорії ДСП вперше для спрощеної псевдоспін-електронної моделі побудовано фазові діаграми основного стану та встановлено можливість фазового переходу I-го роду (бістабільність) при зміні температури та фазового розшарування.

Вперше розроблено варіант теорії збурень за електронним переносом, який ґрунтується на теоремі Віка для операторів Хаббарда і не залежить від ієрархії спарювань. Показано, що ефективна одновузлова задача теорії ДСП точно розпадається на підпростори з різними вакуумними станами і на цій основі вперше побудовано аналітичний термодинамічно самоузгоджений підхід для моделі Хаббарда, в рамках якого одержано аналітичні результати для певних простих наближень, коли отримується двополюсна (наближення типу бінарного сплаву) та чотириполюсна (наближення типу Хартрі-Фока) структура для одноелектронних функцій Гріна.

Показано, що тільки в рамках підходу сильного зв'язку можна побудувати теорію динамічного середнього поля для систем з корельованим переносом (нелокальними багаточастинковими взаємодіями). Вперше побудовано систему рівнянь теорії ДСП для таких систем, отримано вирази для термодинамічного потенціалу типу Бейма-Каданова та розроблено самоузгоджений підхід у функціональних похідних. Для моделі Фалікова-Кімбала з корельованим переносом вперше встановлено наявність та досліджено перехід Мотта при зміні температури.

Вперше розвинено загальну схему розрахунку динамічних сприйнятливостей в рамках підходу сильного зв'язку та розроблено методику отримання незвідних вершин у рамках теорії ДСП. Отримано точний аналітичний вираз для динамічної сприйнятливості та незвідної зарядової вершини для моделі Фалікова-Кімбала в теорії ДСП.

Вперше сформульовано спектральні співвідношення для багаточасових кореляційних функцій з врахуванням неергодичних (збережних) внесків і показано, як відповідні спектральні густини можна послідовно отримати з багаточасових температурних функцій Гріна.

Використовуючи спектральні властивості багаточасових кореляційних функцій, узагальнено теорему Джонсона-Магана для переносу електричного заряду і тепла на випадок багатошарових наноструктур.

Вперше розроблено загальний формалізм аналітичного продовження багаточасових температурних функцій Гріна для отримання нерезонансних, змішаних та резонансних внесків у переріз комбінаційного розсіяння світла на електронних збудженнях і на цій основі в рамках теорії динамічного середнього поля знайдено точні розв'язки для резонансного комбінаційного розсіяння світла для моделі Фалікова-Кімбала.

Запропоновано нове представлення для спектральної функції локалізованих збуджень через детермінанти неперервних матричних операторів типу Тепліца, яке суттєво пришвидшило її розрахунок. Використовуючи підхід Вінера-Гопфа, отримано точні аналітичні формули для довгочасової поведінки функцій Гріна.

Вперше досліджено спектри резонансного непружного розсіяння рентгенівських променів для моделі Фалікова-Кімбала при різних значеннях переданого імпульсу та різних енергіях збудження (менших і більших за поріг поглинання).

Практичне значення одержаних результатів. Розвинутий у дисертації метод самоузгодженого розв'язку ефективної одновузлової задачі теорії ДСП для моделі Хаббарда може бути поширений на інші моделі та задачі в теорії сильноскорельованих систем. На цій основі можна будувати наближення вищого порядку в підході сильного зв'язку.

Побудована теорія ДСП для систем з корельованим переносом служитиме вихідною для дослідження інших моделей з корельованим переносом, що поки що ускладнюється відсутністю розвинутих методів розв'язання одновузлової задачі. Результати дослідження зумовленого температурою переходу Мотта у системах з корельованим переносом можуть бути використані безпосередньо для пояснення експериментальних даних.

Отримані у роботі точні розв'язки для динамічної сприйнятливості та зарядової вершини для моделі Фалікова-Кімбала були використані для розрахунків спектрів нерезонансного комбінаційного розсіяння [Freericks J.K., Devereaux T.P. *Phys. Rev. B*, 2001, **64**, 125110] і зробили можливим проведене у цій дисертаційній роботі дослідження резонансного комбінаційного розсіяння.

Запропонований підхід до отримання спектральних співвідношень для багаточасових кореляційних функцій дає загальний алгоритм, який може бути використаний для знаходження виразів для спостережуваних величин через відповідні багаточасові функції Гріна. У роботі знайдено такий загальний зв'язок для перерізів резонансного комбінаційного розсіяння, який може бути поширений на різні моделі і механізми розсіяння. Зокрема, на його основі було проведене дослідження непружного розсіяння світла та рентгенівських променів для систем з порушеною симетрією (зарядововпорядкована фаза моделі Фалікова-Кімбала) [Matveev O.P., Shvaika A.M., Freericks J.K. *Phys. Rev. B*, 2009, **79**, 115130; 2010, **82**, 155115].

Отримане у роботі формулювання теореми Джонсона-Магана має загальніший характер і може бути використане для опису процесів одночасного переносу електричного заряду і тепла у неоднорідних системах зі суттєвими багаточастинковими взаємодіями.

Запропонований спосіб розрахунку спектрів локалізованих збуджень суттєво швидший за попередні і дозволяє проводити розрахунки для складніших систем як у рівноважному, так і нерівноважному стані, і може бути використаний для опису часововиокремлених процесів.

Особистий внесок здобувача. В написаних у співавторстві працях внесок здобувача визначається наступним чином. При описі псевдоспін-електронної моделі в узагальненому наближенні хаотичних фаз автор приймав безпосередню участь у розвитку методики операторів Хаббарда та проведенні розрахунків кореляційних функцій та динамічних сприйнятливостей [1–3]. Здобувач приймав безпосередню участь у формулюванні узагальненого наближення хаотичних фаз для спрощеної псевдоспін-електронної моделі, постановці конкретних завдань та обговоренні одержаних результатів [5–7], які порівнювалися з результатами теорії динамічного середнього поля, що були отримані здобувачем безпосередньо [4]. З використанням температурної теорії збурень за електронним переносом здобувачем розвинено оригінальний аналітичний метод дослідження моделі Хаббарда в теорії динамічного середнього поля та проаналізовано можливі магнітні впорядкування [13]. Здобувачеві належить постановка задачі про дослідження спектру та динамічних сприйнятливостей моделі Хаббарда на малих кластерах, він контролював виконання розрахунків та приймав участь у обговоренні результатів [23]. При описі переносу електричного заряду і тепла через багатошарові наноструктури автору належать спектральні зображення для відповідних багаточасових кореляційних функцій та отримання узагальненої форми теореми Джонсона-Магана [24]. В усіх інших роботах, як одноосібних [8–12, 14–16, 22] так і у співавторстві [17–21, 25, 26], здобувач приймав активну участь на всіх етапах виконання дослідження, включаючи постановку завдання, вибір методів, виконання як аналітичних так і числових розрахунків, обробці отриманих результатів та формулюванні висновків.

Апробація роботи. Основні результати роботи доповідалися і обговорювалися на: International Workshop on Statistical Physics and Condensed Matter Theory (Lviv, Ukraine, 1995); International School "Strongly Correlated Systems and Critical Phenomena" (Dubna, Russia, 1997); INTAS-Ukraine Workshop on Condensed Matter Physics (Lviv, Ukraine, 1998); European Conference "Physics of Magnetism" (Poznan, Poland, 1999, 2002); Workshop on Modern Problems of Soft Matter Theory (Lviv, Ukraine, 2000); 2nd International Smakula Symposium "Fundamental and Applied Problems of Modern Physics" (Ternopil, Ukraine, 2000); II International Pamporovo Workshop on Cooperative Phenomena in Condensed Matter: Quantum Phases and Phase Transitions (Pamporovo, Bulgaria, 2001); International Conference on Strongly Correlated Electron Systems (Krakow, Poland, 2002; Karlsruhe, Germany, 2004); Annual APS March Meeting (Montreal, Quebec, Canada, 2004; New Orleans, Louisiana, USA, 2008); 7th International Conference on Spectroscopies of Novel Superconductors (Barcelona-Sitges, Spain, 2004); Annual Conference in Ukraine "Statistical Physics 2005: Modern Problems and New Applications" (Lviv, Ukraine, 2005); Workshop on Correlated Thermoelectric Materials and Conference on Concepts in Electron Correlation (Hvar, Croatia, 2005); Різдвяні дискусії (Львів, Україна, 2001, 2003, 2004, 2005, 2007, 2009); Загальні збори Відділення фізики та астрономії НАН України (Київ, Україна, 2008), а також на семінарах в Інституті фізики конденсованих систем НАН України, Інституті фізики Університету М. Кюрі-Склодовської (Люблін, Польща) та на кафедрі фізики Університету Джорджтауну (Вашингтон, округ Колумбія, США).

Публікації. За матеріалами дисертації опубліковано 25 статей у фахових наукових виданнях (серед них 9 статей є одноосібними), 1 препринт, 1 матеріали і 15 тез міжнародних конференцій.

Структура та об'єм дисертації. Дисертаційна робота складається із переліку умовних скорочень, вступу, 8 розділів основної частини, загальних висновків, списку використаних джерел з 289 найменувань, двох додатків і містить 58 рисунків. Робота викладена на 263 сторінках (зі списком використаних джерел і додатками — 315 сторінок).

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

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

У **першому розділі** наведено короткий огляд літератури з багаточастинкової динаміки сильноскорельованих електронних систем, зокрема перераховано найбільш важливі моделі і методи аналітичних та числових розрахунків. Окремо описано основні здобутки теорії динамічного середнього поля, а також перераховано наявні труднощі та нерозв'язані проблеми. Тут також висвітлено важливі віхи у теоретичному описі динамічного відгуку багаточастинкових систем взагалі та непружного розсіяння світла і рентгенівських променів зокрема.

У **другому розділі** з використанням підходу сильного зв'язку розглянуто енергетичний спектр та термодинаміку моделей типу бінарного сплаву (спрощена псевдоспін-електронна модель або модель Фалікова-Кімбала при $g \to U$)

$$H = \sum_i H_i + \sum_{ij\sigma} t_{ij} a^\dagger_{i\sigma} a_{j\sigma}, \qquad H_i = g S^z_i \sum_\sigma n_{i\sigma} - h S^z_i - \mu \sum_\sigma n_{i\sigma} - h S^z_i, \tag{1}$$

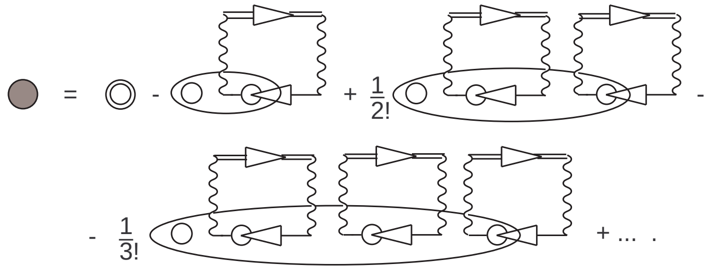
де одновузловий гамільтоніан H_i враховує локальну взаємодію електронів провідності з псевдоспінами (локалізованими електронами $n_{if} = P^+_i = \frac{1}{2} + S^z_i$), які поміщені у поздовжнє поле h (параметр асиметрії ангармонічного потенціалу або хімічний потенціал для локалізованих електронів, $h = \mu_f$). Головна відмінність між цими моделями полягає у способі усереднення за псевдоспіновими змінними (температурне рівноважне статистичне усереднення для псевдоспін-електронної моделі та моделі Фалікова-Кімбала і конфігураційне усереднення для бінарного сплаву) та у способі отримання самоузгоджених розв'язків (фіксоване значення поздовжнього поля h для псевдоспін-електронної моделі, фіксоване значення концентрації однієї з компонент c для бінарного сплаву та фіксоване значення концентрації електронів: повної чи для кожної з підсистем — для моделі Фалікова-Кімбала). Розрахунок виконувався з використанням теорії збурень за електронним переносом (підхід сильного зв'язку $g \gg t$), коли одноелектронна функція Гріна визначається з рівняння Ларкіна, формальний розв'язок якого має вигляд

$$G_\sigma(\mathrm{i}\omega_n, \boldsymbol{k}) = \frac{1}{\Xi^{-1}_\sigma(\mathrm{i}\omega_n, \boldsymbol{k}) - \varepsilon_{\boldsymbol{k}}}.$$

Спочатку розрахунок виконувався в рамках узагальненого наближення хаотичних фаз (УНХФ), коли незвідна частина одноелектронної функції Гріна розраховувалася у наближенні Хаббард-I ($P^\pm = \frac{1}{2} \pm S^z$)

$$\Xi_\sigma(\mathrm{i}\omega_n, \boldsymbol{k}) = g(\mathrm{i}\omega_n) = \frac{\langle P^+ \rangle}{\mathrm{i}\omega_n + \mu - g/2} + \frac{\langle P^- \rangle}{\mathrm{i}\omega_n + \mu + g/2}.$$

Середнє значення оператора псевдоспіну отримувалося у наближенні середнього поля

$\langle S_l^z \rangle =$ 

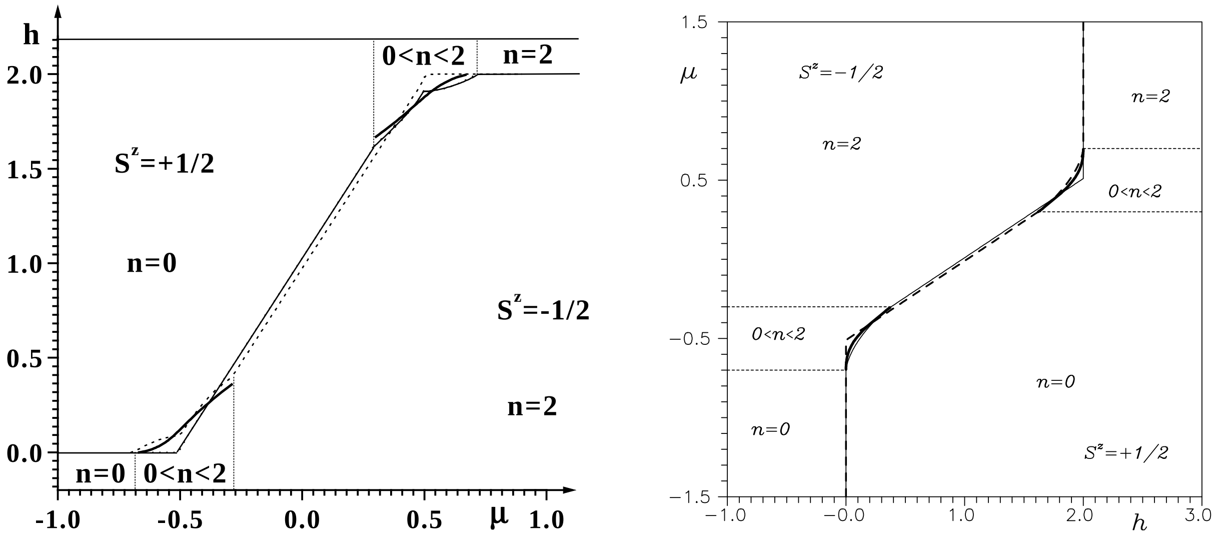
де перенормування кумулянтів здійснюється за рахунок вставок петлевих фрагментів (“однохвосток”). Отримано вираз для термодинамічного потенціалу.

З метою встановлення меж застосовності УНХФ проводилося порівняння з результатами теорії динамічного середнього поля (ДСП), яка дає точні розв’язки для моделей типу бінарного сплаву в границі нескінченої вимірності простору. У теорії ДСП незвідна частина у рівнянні Ларкіна є локальною $\Xi_\sigma(\mathrm{i}\omega_n, \boldsymbol{k}) = \Xi_\sigma(\mathrm{i}\omega_n)$ і знаходиться з розв’язку ефективної одновузлової задачі з динамічним середнім полем $\lambda_\sigma(\tau-\tau')$. Для моделей типу бінарного сплаву отримано систему рівнянь для знаходження незвідної частини і динамічного середнього поля

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} \frac{\rho(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon}{\Xi_\sigma^{-1}(\mathrm{i}\omega_n)-\varepsilon} = \frac{1}{\Xi_\sigma^{-1}(\mathrm{i}\omega_n)-\lambda_\sigma(\mathrm{i}\omega_n)} = \frac{\mathrm{i}\omega_n+\mu-\lambda_\sigma(\mathrm{i}\omega_n)+g\langle S^z\rangle}{[\mathrm{i}\omega_n+\mu-\lambda_\sigma(\mathrm{i}\omega_n)]^2-\frac{g^2}{4}},$$

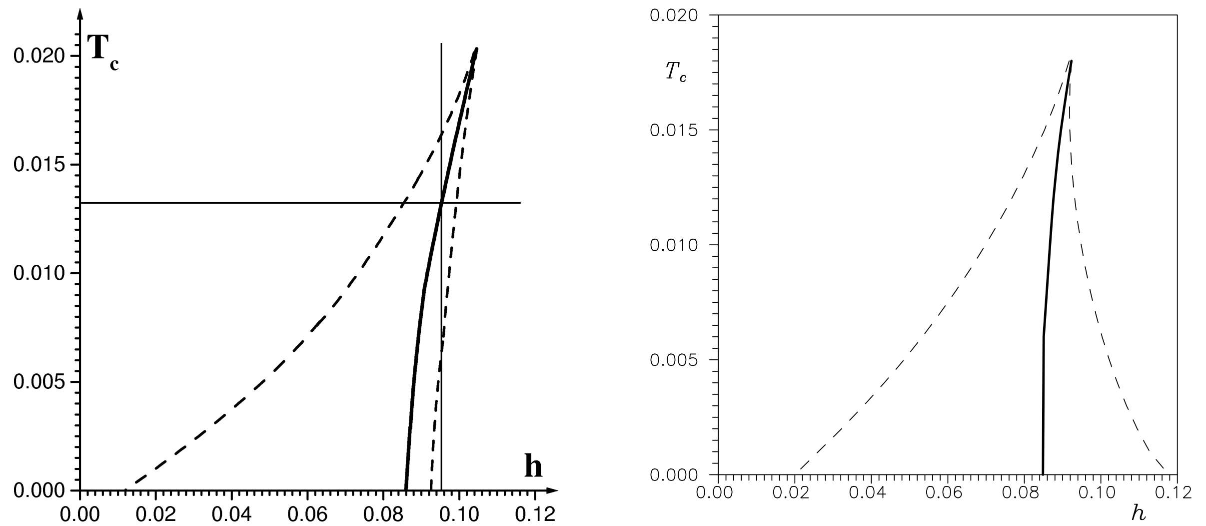
а також рівняння стану для знаходження $\langle S^z \rangle$. Було отримано вираз для статистичної суми та доведено тотожність виразів Фалікова-Кімбала-Плішке [Plischke M. *Phys. Rev. Lett.*, 1972, **28**, 361] та Брандта-Мільша [Brandt U., Mielsch C. *Z. Phys. B*, 1991, **82**, 37] для вільної енергії нескінченновимірної моделі Фалікова-Кімбала.

Для напівеліптичної густини станів $\rho(\varepsilon) = \frac{2}{\pi W^2}\sqrt{W^2-\varepsilon^2}$ досліджено розв’язки рівнянь УНХФ та теорії ДСП, встановлено межі електронних зон та умови появи щілини в одноелектронному спектрі, на основі чого було побудовано фазову діаграму $\mu - h$ (рис. 1), де вказано області стійкості станів з $\langle S^z \rangle = \pm\frac{1}{2}$ та лінії фазових переходів I-го роду за полем та хімічним потенціалом між однорідними фазами з різними значеннями $\langle S^z \rangle$ та концентрації електронів при $T = 0$. Зі зростанням температури межі стійкості фаз зближуються і відповідна фазова діаграма $T_c - h$ зображена на рис. 2. Як видно, у порівнянні з моделлю Ізинґа, крива співіснування фаз зміщена по полю та нахилена від вертикальної лінії, що приводить до можливості фазового переходу першого роду зі зміною температури для псевдоспін-електронної моделі у вузькій області значень поля h. Порівняння з результатами УНХФ показує, що точніше врахування одновузлових кореляцій у теорії ДСП приводить до розширення області стійкості фаз та незначного пониження температури трикритичної точки. У випадку фіксованого значення концентрації електронів (режим $n = \mathrm{const}$) фазовий перехід першого роду перетворюється у фазове розшарування, коли система розшаровується на області з різним значенням концентрації електронів та середнього значення псевдоспіну і електронний



а) б)

Рис. 1. Фазова діаграма $\mu - h$ для $g = 1$, $t = W = 0.2$ та $T = 0$. Товсті суцільні лінії зображають точки фазового переходу першого роду. а) УНХФ ; б) теорія ДСП.



а) б)

Рис. 2. Фазова діаграма $T_c - h$: суцільна та штрихові лінії вказують лінію фазового переходу першого роду та межі стійкості фаз, відповідно ($g = 1$, $t = W = 0.2$, $\mu = -0.5$). а) УНХФ ; б) теорія ДСП.

спектр містить як широку незаповнену електронну зону і заселені локалізовані стани для областей з $n \sim 0$, так і частково заселену широку електронну зону і незаселені локалізовані стани для областей з $n \sim 1$. Відповідна фазова діаграма $T - n$ зображена на рис. 3. Також досліджено термодинаміку фазових переходів між однорідними та зарядововпорядкованими фазами, враховуючи фазове розшарування, побудовані відповідні фазові діаграми.

У **третьому розділі** розвинено загальний підхід сильного зв'язку до теорії сильноскорельованих електронних систем, який ґрунтується на теорії збурень за міжвузловим електронним переносом. Розглядається ґраткова електронна систе-

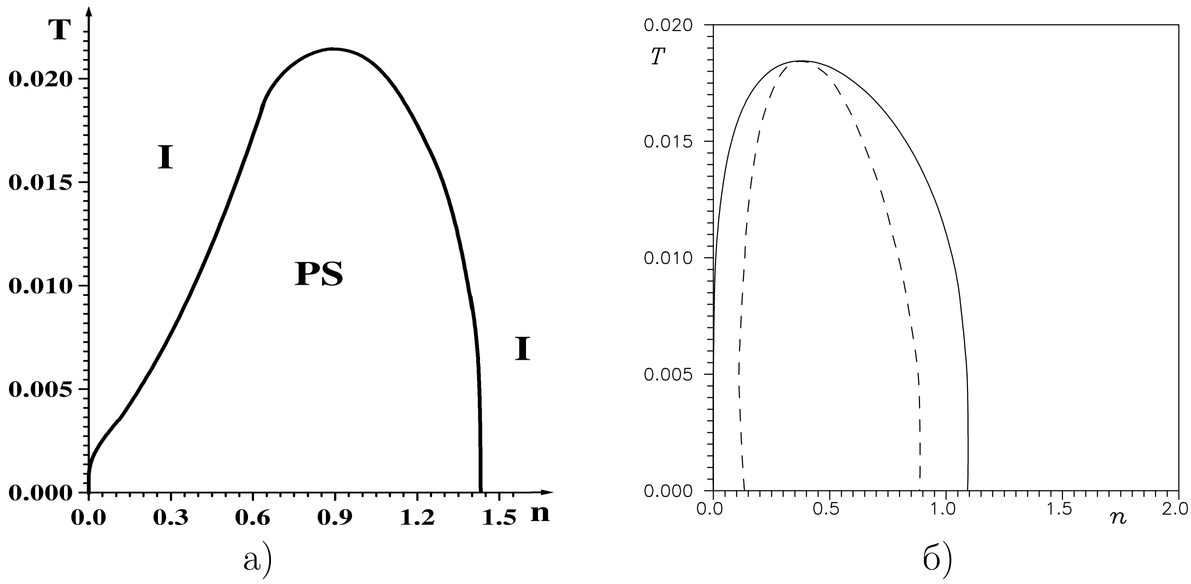


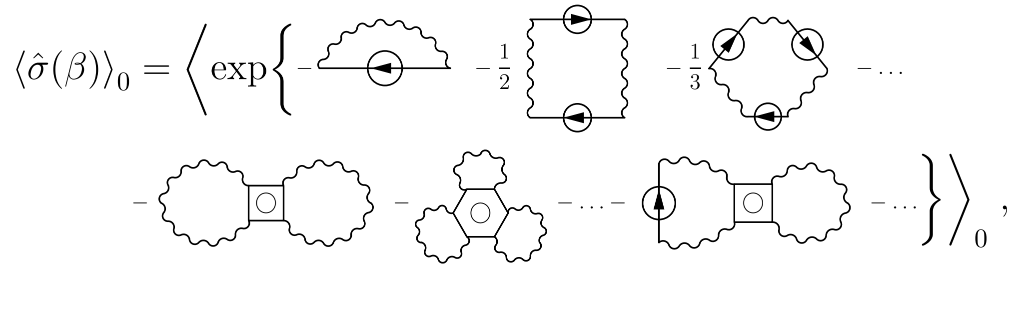
Рис. 3. Фазова діаграма $T-n$ для фазового розшарування: суцільна лінія — бінодалі, штрихова лінія — спінодалі ($g=1$, $W=0.2$, $h=0.1$). а) УНХФ ; б) теорія ДСП.

ма, яка в загальному випадку задається статистичним оператором

$$\hat{\rho} = \mathrm{e}^{-\beta \hat{H}_0} \hat{\sigma}(\beta), \quad \hat{\sigma}(\beta) = T \exp\left\{ - \int_0^\beta \mathrm{d}\tau \int_0^\beta \mathrm{d}\tau' \sum_{ij\sigma} t_{ij}^{\sigma}(\tau-\tau') a_{i\sigma}^{\dagger}(\tau) a_{j\sigma}(\tau') \right\},$$

де $\hat{H}_0 = \sum_i \hat{H}_i$ — сума одновузлових внесків і для моделі Хаббарда слід покласти $H_i = U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \mu(n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) - h(n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow})$ та $t_{ij}^{\sigma}(\tau-\tau') = t_{ij}\delta(\tau-\tau')$. Вважається, що відомі власні значення та власні функції одновузлового гамільтоніану $H_i|i,p\rangle = E_p|i,p\rangle$ та можна ввести оператори Хаббарда $\hat{X}_i^{pq} = |i,p\rangle\langle i,q|$, так, що у відповідному зображенні гамільтоніан нульового наближення стає діагональний $H_0 = \sum_i \sum_p E_p \hat{X}_i^{pp}$, де для моделі Хаббарда $p = 0,\, 2,\, \uparrow$ і $\downarrow$.

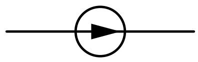
Матриця розсіяння $\hat{\sigma}(\beta)$ розкладається в ряд за електронним переносом і для $\langle\sigma(\beta)\rangle_0$ отримуємо ряд добутків інтегралів переносу та середніх від певної кількості операторів народження та знищення електронів, які зображаються через оператори Хаббарда. Розрахунок середніх від добутків операторів Хаббарда виконується з використанням відповідної теореми Віка [Слободян П.М., Стасюк И.В. *ТМФ*, 1974, **19**, 423] з подальшим групуванням доданків з однаковими діагональними операторами Хаббарда, що дозволяє отримати результат, який не залежить від ієрархії спарювань. Проводячи послідовно спарювання для кожного з доданків у розкладі для $\langle\hat{\sigma}(\beta)\rangle_0$, отримано наступне діаграмне зображення



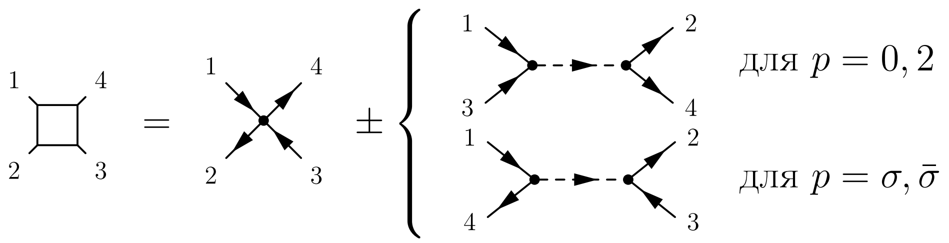
(2)

де стрілки зображають нульові функції Гріна $g_{pq}(\mathrm{i}\omega_n)$, хвилясті лінії — інтеграли переносу, а $\square$, … позначають деякі складні “n-вершини” і, для такого формулювання теорії збурень, дорівнюють незвідним багаточастинковим функціям Гріна, які розраховуються з одновузловим гамільтоніаном. Такий підхід подібний до кумулянтних розкладів в узагальненій теоремі Віка [Владимир М.И., Москаленко В.А. *ТМФ*, 1990, **82**, 428; Вакару С.И., Владимир М.И., Москаленко В.А. *ТМФ*, 1990, **85**, 248], але відрізняється способом отримання незвідних багаточастинкових вершин. У нас кожна вершина (багаточастинкова функція Гріна) множиться ще на діагональний оператор Хаббарда, який зображено бульбашкою, і отримується вираз зі середнім від добутків діагональних операторів Хаббарда. Після застосування теореми Віка задача розпалася на дві: 1) розрахунок незвідних багаточастинкових функцій Гріна (вершин) та 2) розрахунок середніх від добутків діагональних операторів Хаббарда і підсумовування кінцевих рядів.

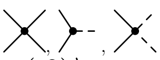
Виявляється, що вирази для багаточастинкових функцій Гріна розпадаються на чотири доданки з різними діагональними операторами Хаббарда $\hat{X}^{pp}$, які проектують одновузлову задачу на певні “вакуумні” стани (підпростори), і незбуреними функціями Гріна, які описують усі можливі процеси збудження та розсіяння відносно заданих “вакуумних” станів. А саме, народження або знищення одного електрона чи дублона (пари електронів з протилежними спінами) для підпросторів $p = 0$ і $p = 2$ та народження або знищення одного електрона чи магнона (переворот спіна) для підпросторів $p =\uparrow$ і $p =\downarrow$. Зокрема маємо для двополюсника


$$= g_{\sigma 0}(\mathrm{i}\omega_n)(\hat{X}_i^{\sigma\sigma} + \hat{X}_i^{00}) + g_{2\bar{\sigma}}(\mathrm{i}\omega_n)(\hat{X}_i^{22} + \hat{X}_i^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}}) \equiv \sum\nolimits_p \hat{X}_i^{pp} g_{\sigma(p)}(\mathrm{i}\omega_n),$$

для чотириполюсника



,

де точки зображають енергію кулонівської кореляції $U = E_2 + E_0 - E_\uparrow - E_\downarrow$, а штрихові стрілки — бозонні функції Гріна нульового порядку: дублонну $g_{20}(\mathrm{i}\omega_m)$ або магнонну $g_{\sigma\bar{\sigma}}(\mathrm{i}\omega_m)$, і т.п. для багаточастинкових функцій Гріна вищих порядків. Отже, можна ввести прості вершини  з допомогою яких можна побудувати усі n-полюсники у розкладі для $\langle \sigma(\beta) \rangle_0$ згідно з певними правилами.

Показано, що для великого термодинамічного потенціалу одновузлової задачі теорії ДСП Ω_a можна записати такий самий діаграмний розклад, як і у виразі (2), але тепер слід розраховувати середнє від добутків діагональних X-операторів на тому самому вузлі, які перемножуються і зводяться до одного оператора X. Остаточно, для великого термодинамічного потенціалу одновузлової задачі отримуємо вираз $\Omega_a = -\frac{1}{\beta}\ln\sum_p \mathrm{e}^{-\beta\Omega_{(p)}}$, де $\Omega_{(p)}$ — "великі термодинамічні потенціали" для підпросторів.

Знайдено, що одноелектронна функція Гріна для одновузлової задачі зображається у вигляді

$$G_\sigma^{(a)}(\tau-\tau') = \frac{\delta\Omega_a}{\delta\lambda_\sigma(\tau'-\tau)} = \sum\nolimits_p w_p G_{\sigma(p)}(\tau-\tau'),$$

а відповідні фур'є-образи одноелектронних функцій Гріна

$$G_{\sigma(p)}(\mathrm{i}\omega_n) = \frac{1}{\Xi^{-1}_{\sigma(p)}(\mathrm{i}\omega_n) - \lambda_\sigma(\mathrm{i}\omega_n)}, \qquad \Xi^{-1}_{\sigma(p)}(\mathrm{i}\omega_n) = g^{-1}_{\sigma(p)}(\mathrm{i}\omega_n) - \Sigma_{\sigma(p)}(\mathrm{i}\omega_n)$$

для підпросторів зі "статистичними вагами" $w_p = \mathrm{e}^{-\beta\Omega_{(p)}}/\sum_q \mathrm{e}^{-\beta\Omega_{(q)}}$ і власноенергетичними частинами $\Sigma_{\sigma(p)}(\mathrm{i}\omega_n)$ залежать від локальних інтегралів переносу $\lambda_{\sigma'}(\mathrm{i}\omega_{n'})$ тільки через величини $\Psi_{\sigma'(p)}(\mathrm{i}\omega_{n'}) = G_{\sigma'(p)}(\mathrm{i}\omega_{n'}) - \Xi_{\sigma'(p)}(\mathrm{i}\omega_{n'})$. Тобто одновузлова задача точно розпадається на окремі задачі для підпросторів, напр., $p = 0,\ 2,\ \downarrow,\ \uparrow$ для моделі Хаббарда, з різними "вакуумними" станами і "статистичними вагами".

На основі розвиненого підходу побудовано різного роду самоузгоджені наближення. Зокрема, найпростіше наближення $\Sigma_{\sigma(p)}(\mathrm{i}\omega_n) = 0$ відповідає "невзаємодіючим" ферміонам у підпросторах і дає для функції Гріна одновузлової задачі двополюсний вираз сплавного наближення для моделі Хаббарда (нульове наближення для даного підходу) і точний розв'язок для моделі Фалікова-Кімбала $[\lambda_\downarrow(\mathrm{i}\omega_n) = 0]$. Перше ненульове наближення для власноенергетичної частини $\Sigma_{\sigma(p)}(\mathrm{i}\omega_n) = \frac{1}{\beta}\sum_{n'} U\Psi_{\bar\sigma(p)}(\mathrm{i}\omega_{n'})$ відповідає наближенню Хартрі-Фока для підпросторів, що дає для функції Гріна одновузлової задачі чотириполюсний вираз

$$G_\sigma^{(a)}(\mathrm{i}\omega_n) = \sum_{p=0,\uparrow,\downarrow,2} \frac{w_p}{\mathrm{i}\omega_n + \mu_\sigma - Un_{\bar\sigma(p)} - \lambda_\sigma(\mathrm{i}\omega_n)}. \tag{3}$$

На рис. 4 приведені повна густина одночастинкових станів $\rho_\sigma(\omega) = -\frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\, G_\sigma^{(a)}(\omega)$, а також внески від підпросторів [окремих доданків у (3)] для різних значень концентрації електронів. Отримано, що хоча густина станів має два піки, які відповідають різним хаббардівським зонам, кожна зона, у свою чергу, формується двома близькими піками: $p = 0$ та σ для нижньої хаббардівської зони і $p = 2$ та $\bar\sigma$ для верхньої, — зі статистичними вагами w_p. Основні внески походять від підпросторів $p = 0$ для малих концентрацій електронів ($n < \frac{2}{3}$, $\mu < 0$), $p = 2$ для малих концентрацій дірок ($2 - n < \frac{2}{3}$, $\mu > U$) та $p = \sigma, \bar\sigma$ поблизу половинного заповнення. На основі аналізу розв'язків, як для ґратки так і для дво- і тривузлового кластерів, отримано, що підпростори $p = 0$ та $p = 2$ описують фермі-рідинну компоненту (електронну та діркову, відповідно), яка домінує при малих концентраціях електронів або дірок, коли хімічний потенціал перебуває поблизу нижнього краю

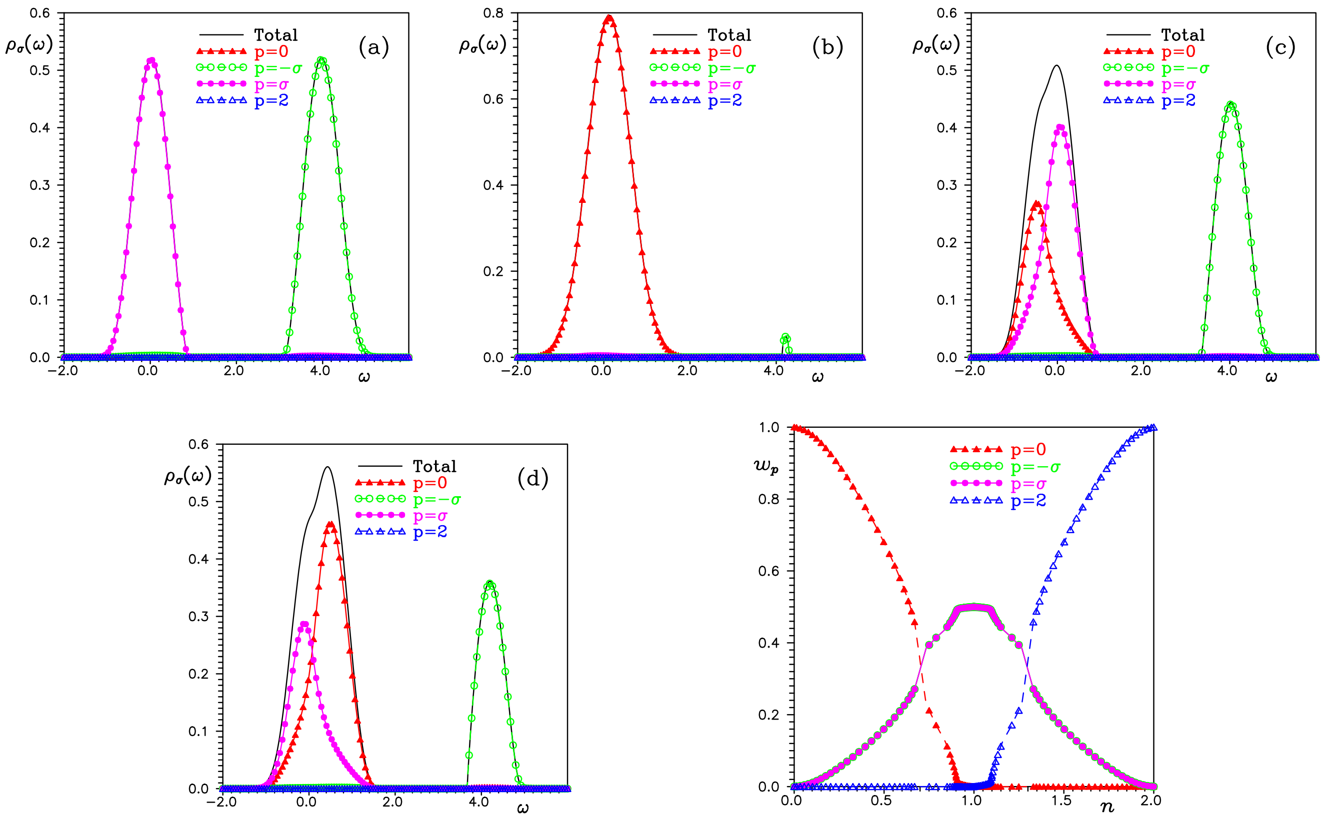


Рис. 4. Густина станів $\rho_\sigma(\omega)$, повна та для окремих підпросторів, при різних значеннях хімічного потенціалу: (a) $\mu = \frac{U}{2}$, $n = 1$; (b) $\mu = -1$, $n = 0.07$; (c) $\mu = 0.01$, $n = 0.72$; (d) $\mu = -0.01$, $n = 0.66$ ($U = 4$, $T = 0.2$), та статистичні ваги підпросторів w_p в залежності від концентрації електронів.

нижньої зони або верхнього краю верхньої зони, і знаходиться у феромагнітному стані при низьких температурах, а підпростори $p =\uparrow$ та $\downarrow$ описують не-фермі-рідинну компоненту (типу резонансних валентних зв'язків [Anderson P.W. *Science*, 1987, **235**, 1196]) з антиферомагнітним впорядкуванням при низьких температурах, яка домінує поблизу половинного заповнення. Отже, в рамках отриманого наближення типу Хартрі-Фока, при концентраціях електронів $n \approx \frac{2}{3}$ та $2 - n \approx \frac{2}{3}$ відбувається квантовий фазовий перехід (перебудова основного стану) між цими двома режимами: фермі-рідинним та не-фермі-рідинним, що нагадує відомі властивості ВТНП-купратів, які у нелегованому випадку ($n = 1$) перебувають у стані антиферомагнітного діелектрика, потім при низькому легуванні киснем проявляється не-фермі-рідинна поведінка (недолегований випадок $n \lesssim 1$), а після певного оптимального легування їхні властивості різко змінюються з не-фермі-рідинних на фермі-рідинні (перелегований випадок). В кінці розділу також аналізуються різні способи виходу за рамки наближення типу Хартрі-Фока, зокрема шляхом врахування самоузгодженого перенормування бозонних збуджень.

Четвертий розділ присвячений застосуванню підходу сильного зв'язку до побудови теорії ДСП для систем з корельованим переносом, для яких власноенергетична частина стає нелокальною. Показано, що в рамках такого підходу зручно переписати доданок з міжвузловим корельованим переносом

$$H_t = \frac{1}{\sqrt{D}} \sum_{\langle ij \rangle \sigma} \left[t_1 a_{i\sigma}^\dagger a_{j\sigma} + t_2 a_{i\sigma}^\dagger a_{j\sigma} \left(n_{i\bar{\sigma}} + n_{j\bar{\sigma}} \right) + t_3 a_{i\sigma}^\dagger a_{j\sigma} n_{i\bar{\sigma}} n_{j\bar{\sigma}} \right]$$

у матричному вигляді через оператори Хаббарда

$$H_t = \frac{1}{\sqrt{D}} \sum_{\langle ij \rangle \sigma} \mathbf{a}_{i\sigma}^\dagger \mathbf{t}_{ij} \mathbf{a}_{j\sigma}, \quad \mathbf{a}_{i\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma X_i^{\bar{\sigma}2} \\ X_i^{0\sigma} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{t}_{ij} = \begin{pmatrix} t_{ij}^{++} & t_{ij}^{+-} \\ t_{ij}^{-+} & t_{ij}^{--} \end{pmatrix},$$

що дозволяє розглядати усі доданки з корельованим переносом однаковим чином. Відповідно, одноелектронна функція Гріна виражається через функції Гріна

$$\mathbf{G}_{ij\sigma}(\tau - \tau') = -\left\langle T \mathbf{a}_{i\sigma}(\tau) \otimes \mathbf{a}_{j\sigma}^\dagger(\tau') \right\rangle = \beta \frac{\delta \Omega}{\delta \mathbf{t}_{ji}(\tau' - \tau)},$$

які побудовані на операторах Хаббарда і знаходяться з розв'язку матричного рівняння Ларкіна

$$\mathbf{G}_{\boldsymbol{k}}(\omega) = \left[\mathbb{I} - \mathbf{\Xi}_{\boldsymbol{k}}(\omega) \mathbf{t}_{\boldsymbol{k}} \right]^{-1} \mathbf{\Xi}_{\boldsymbol{k}}(\omega) = \left[\mathbf{\Xi}_{\boldsymbol{k}}^{-1}(\omega) - \mathbf{t}_{\boldsymbol{k}} \right]^{-1}.$$

Перевагою даного підходу є те, що у границі нескінченої вимірності простору матрична незвідна частина функції Гріна стає локальною $\mathbf{\Xi}_{ij}(\omega) = \delta_{ij}\mathbf{\Xi}(\omega)$, або $\mathbf{\Xi}_{\boldsymbol{k}}(\omega) = \mathbf{\Xi}(\omega)$. Таке матричне зображення дозволило переформулювати теорію ДСП систем з корельованим переносом на мові локальних величин і отримати замкнену систему рівнянь для локальних функцій — динамічного середнього поля $\mathbf{J}(\omega)$ та незвідної частини $\mathbf{\Xi}(\omega)$

$$\frac{1}{N} \sum\nolimits_{\boldsymbol{k}} \left[\mathbf{G}_{\text{imp}}^{-1}(\omega) + \mathbf{J}(\omega) - \mathbf{t}_{\boldsymbol{k}} \right]^{-1} = \mathbf{G}_{\text{imp}}(\omega), \qquad \mathbf{\Xi}^{-1}(\omega) = \mathbf{G}_{\text{imp}}^{-1}(\omega) + \mathbf{J}(\omega),$$

де $\mathbf{G}_{\text{imp}}(\omega)$ — матриця функцій Гріна для одновузлової задачі з динамічним середнім полем $\mathbf{J}(\omega)$. Інша перевага даного підходу полягає у забезпеченні правильних аналітичних властивостей усіх величин [$\sim C_\alpha/\omega$ ($C_\alpha \neq 1$) при $\omega \to \infty$], що дозволило побудувати зображення Лемана для функцій Гріна, незвідної частини та динамічного середнього поля. З аналізу діаграмних рядів теорії збурень за електронним переносом отримано, що незвідна частина $\mathbf{\Xi}_{\boldsymbol{k}}(\mathrm{i}\omega_\nu)$ залежить від електронного переносу тільки через суму ланцюжкових внесків, яка дорівнює $\tilde{\mathbf{t}}_{\boldsymbol{k}}(\mathrm{i}\omega_\nu) = \mathbf{t}_{\boldsymbol{k}}(\mathrm{i}\omega_\nu) \left[\mathbb{I} - \mathbf{\Xi}_{\boldsymbol{k}}(\mathrm{i}\omega_\nu) \mathbf{t}_{\boldsymbol{k}}(\mathrm{i}\omega_\nu) \right]^{-1}$. На основі цього одержано великий термодинамічний потенціал для систем з корельованим переносом

$$\frac{\Omega_{\text{lat}}}{N} = \Omega_0 - \frac{1}{\beta N} \sum_{\nu \boldsymbol{k}} \left\{ \ln \det \left[\mathbb{I} - \mathbf{\Xi}_{\boldsymbol{k}}(\mathrm{i}\omega_\nu) \mathbf{t}_{\boldsymbol{k}}(\mathrm{i}\omega_\nu) \right] + \mathrm{Sp} \left[\mathbf{\Xi}_{\boldsymbol{k}}(\mathrm{i}\omega_\nu) \tilde{\mathbf{t}}_{\boldsymbol{k}}(\mathrm{i}\omega_\nu) \right] \right\} + \frac{\tilde{\Phi}_{\text{lat}}}{N}, \quad (4)$$

де $\tilde{\Phi}_{\text{lat}}$ — функціонал типу Латинджера-Ворда у підході сильного зв'язку $\beta \frac{\delta \tilde{\Phi}_{\text{lat}}}{\delta \tilde{t}_{\boldsymbol{k}}^{\gamma\alpha}(\tau)} = \Xi_{\boldsymbol{k}}^{\alpha\gamma}(\tau)$, а також зв'язок великого термодинамічного потенціалу для ґратки з відповідними величинами для одновузлової задачі

$$\frac{\Omega_{\text{lat}}}{N} = \Omega_{\text{imp}} - \frac{1}{\beta} \sum_{\nu} \left\{ \frac{1}{N} \sum_{\boldsymbol{k}} \ln \det \left[\mathbb{I} - \boldsymbol{\Xi}(\mathrm{i}\omega_\nu) \mathbf{t}_{\boldsymbol{k}} \right] - \ln \det \left[\mathbb{I} - \boldsymbol{\Xi}(\mathrm{i}\omega_\nu) \mathbf{J}(\mathrm{i}\omega_\nu) \right] \right\}.$$

Отримані формули подібні до аналогічних формул у підході Бейма-Каданова, що дозволило побудувати самоузгоджену теорію в функціональних похідних та одержати вирази для середніх значень операторів та динамічних сприйнятливостей.

Розроблена вище теорія була застосована до опису моделі Фалікова-Кімбала з корельованим переносом. У цьому випадку повна ґраткова функція Гріна у зображенні Дайсона має вигляд

$$G_{\boldsymbol{k}}(\omega) = \frac{1}{\omega + \mu_d - \Sigma_{\boldsymbol{k}}(\omega) - \bar{t}_{\boldsymbol{k}}},$$

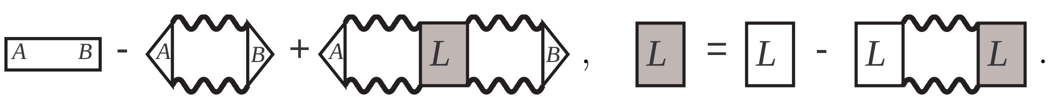
де $\bar{t}_{\boldsymbol{k}} = t_{\boldsymbol{k}}^{++} \langle P^+ \rangle^2 + t_{\boldsymbol{k}}^{--} \langle P^- \rangle^2 + \left(t_{\boldsymbol{k}}^{+-} + t_{\boldsymbol{k}}^{-+} \right) \langle P^+ \rangle \langle P^- \rangle$ — перенормований у дусі Хартрі (середнього поля) перенос [Schiller A. *Phys. Rev. B*, 1999, **60**, 15660], і

$$\Sigma_{\boldsymbol{k}}(\omega) = U \langle P^+ \rangle + J_3(\omega) \langle P^+ \rangle \langle P^- \rangle + \frac{U_{1\boldsymbol{k}}(\omega) U_{2\boldsymbol{k}}(\omega) \langle P^+ \rangle \langle P^- \rangle}{\omega + \mu_d - U \langle P^- \rangle - \bar{J}(\omega) - t_{3\boldsymbol{k}} \langle P^+ \rangle \langle P^- \rangle}$$

— нелокальна власноенергетична частина, де $U_{1\boldsymbol{k}}(\omega)$ і $U_{2\boldsymbol{k}}(\omega)$ враховують динамічне перенормування кулонівської взаємодії U.

На рис. 5 представлені густини станів (уявні частини функцій Гріна) та їхні компоненти для різних співвідношень t_2/t_1 ($t_3 = 0$) при половинному заповненні $\mu_d = \mu_f$, $n_f + n_d = 1$. Як видно, форма густини станів суттєво залежить від співвідношення параметрів корельованого переносу t_2/t_1 і для точок $t_2/t_1 = 0$ та $t_2/t_1 = -1$ отримуємо симетричну густину станів. Симетрія зонної картини визначається, з одного боку, співвідношенням параметрів $|t^{++}|/|t^{--}|$, а з другого боку, відхиленням заселеності f-станів від половинного заповнення $n_f - \frac{1}{2}$ (див. рис. 6). При високих температурах $n_f \to \frac{1}{2}$ і величина щілини у спектрі досягає максимального значення, тоді як з пониженням температури зміна заселеності f-станів може привести до закриття щілини і переходу Мотта (див. рис. 7).

У **п'ятому розділі** розроблено загальну схему розрахунку динамічних сприйнятливостей в рамках підходу сильного зв'язку для сильноскорельованих електронних систем. Даний підхід ґрунтується на розкладах за електронним переносом відносно атомарної границі, коли сприйнятливості можна отримати як другі функціональні похідні за відповідними спряженими полями від функціоналу (4), що дає наступний діаграмний вираз (аналог рівняння Бете-Салпітера)

$\chi_{\boldsymbol{q}}^{AB}(\mathrm{i}\omega_\nu) =$  (5)

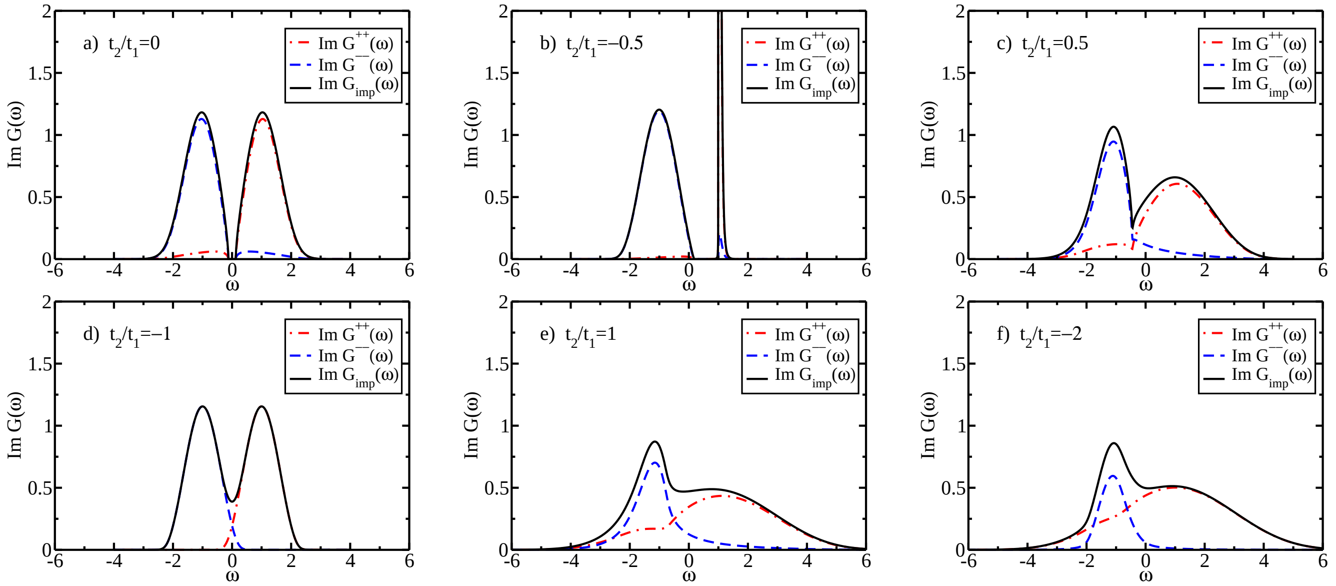


Рис. 5. Густини станів (уявні частини функцій Гріна) та їхні компоненти для різних співвідношень t_2/t_1 ($t_3 = 0$) для $D = \infty$ гіперкубічної ґратки з переносом між найближчими сусідами ($W = 1$, $U = 2$, $T = 0.01$) при половинному заповненні $\mu_d = \mu_f$, $n_f + n_d = 1$.

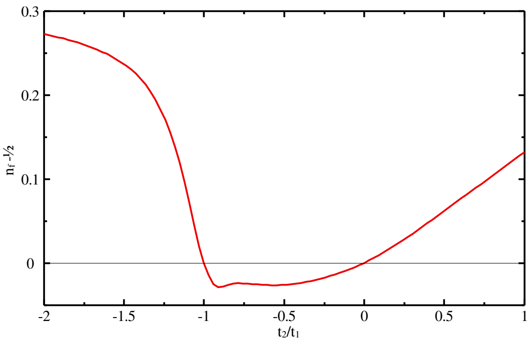


Рис. 6. Відхилення від половинного заповнення заселеності f-станів в залежності від співвідношення параметрів корельованого переносу t_2/t_1. Значення параметрів такі самі як на рис. 5.

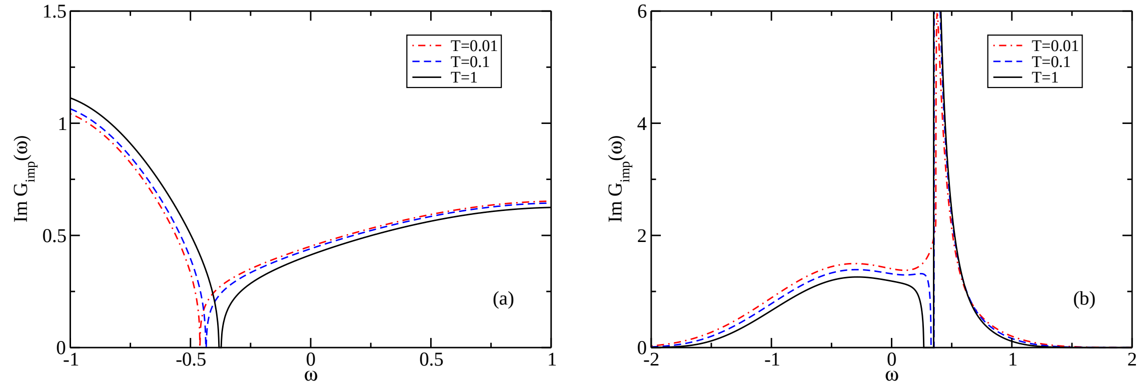
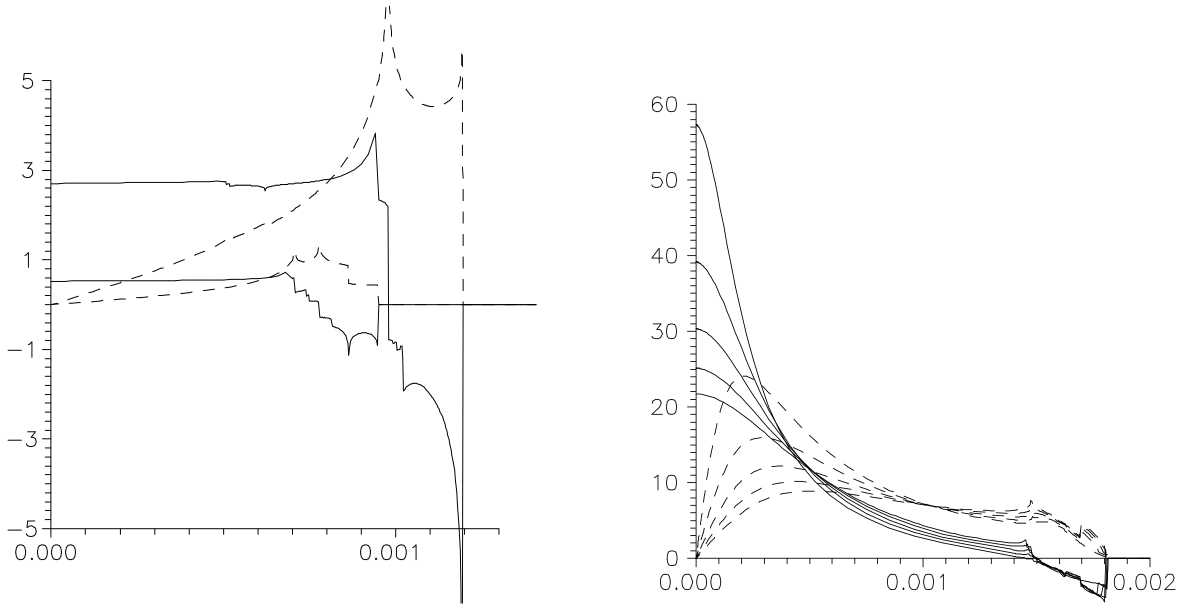


Рис. 7. Поява щілини при зміні температури (перехід Мотта) для (a) $t_2/t_1 = 0.5$, $U = 2.1$ та (b) $t_2/t_1 = -0.5$, $U = 0.7$.

Тут хвилясті лінії зображають суму ланцюжків ліній переносу, а $\boxed{}$, $\langle$ та $\boxed{L}$ — незвідні вершини, які не розпадаються на незалежні частини при розрізанні двох ліній переносу і відповідають незвідним багаточастинковим функціям Гріна.

Для псевдоспін-електронної моделі (1) з врахуванням одновузлової кулонівської взаємодії $H_i = Un_{i\uparrow}n_{i\downarrow} + (gS_i^z - \mu)(n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) - \Omega S_i^x - hS_i^z$ проведено розрахунок



а) б)

Рис. 8. Частотна залежність дійсної (суцільна лінія) та уявної (штрихова лінія) частин динамічної сприйнятливості при різних температурах: (а) 2, 0.2, (б) 0.02, 0.018, 0.016, 0.014, 0.012 ($U \to \infty$, $g = 1$, $W = 0.2$, $h = 1.1$, $n = 0.95$, $\boldsymbol{q}/\pi = (0.01, 0.001)$).

кореляційних функцій в рамках узагальненого наближення хаотичних фаз, коли мацубарівські функції Гріна, які побудовані на операторах псевдоспіна та числа електронів, можна записати у вигляді

$$K\left(\mathrm{i}\omega_n, \boldsymbol{q}\right) = \beta \bar{\bar{\bar{K}}}(\boldsymbol{q}) \delta\left(\mathrm{i}\omega_n\right) + \Pi''(\mathrm{i}\omega_n, \boldsymbol{q})\,. \tag{6}$$

Останній доданок у виразі (6) визначає ізольовану сприйнятливість (відгук Кубо), тоді як перший доданок [з множником $\delta(\mathrm{i}\omega_n)$] дає внесок у т.з. ізотермічну сприйнятливість. При розрахунку динамічного відгуку $\Pi''(\mathrm{i}\omega_n, \boldsymbol{q})$ підсумовувалися ряди драбинкових діаграм з антипаралельними лініями в дусі УНХФ. Для випадку $U \to \infty$ досліджено низькочастотну динаміку поблизу точок нестійкостей відносно флуктуацій заряду та поляризації. Встановлено, що на температурній залежності сприйнятливостей виникають розбіжності при певній температурі T^*, які пов'язані з виникненням нестійкостей діелектричного типу в псевдоспіновій підсистемі під дією ефективних взаємодій. Відповідна перебудова низькоенергетичного спектру в околі нестійкості зображена на рис. 8: при високих температурах спостерігається складний спектр, який зумовлений багатозонною структурою та сингулярностями ван-Хове, а при пониженні температури відбувається перекачування інтенсивності з високоенергетичної частини спектру в низькоенергетичну з утворенням ізосбестичної точки внаслідок наростання "м'якої" релаксаційної моди дебаївського типу, швидкість загасання якої в околі температури нестійкості задовольняє закон Кюрі-Вейса.

Розроблено загальну схему розрахунку динамічних сприйнятливостей у підході сильного зв'язку (5) в рамках теорії ДСП. Показано, що в границі нескінченої вимірності простору усі незвідні вершини стають локальними і запропоновано алгоритм їх отримання з відповідних багаточастинкових функцій Гріна для одновузлової задачі. Для моделей типу бінарного сплаву знайдено точні аналітичні вирази для багаточастинкових функцій Гріна одновузлової задачі та отримано явні вирази для незвідних вершин і сприйнятливостей. Так само, як і у підході УНХФ, зарядова сприйнятливість містить два доданки

$$\chi_{\boldsymbol{q}}^{nn}(\mathrm{i}\omega_\nu) = \delta_{\nu 0}\frac{\Delta_n^2}{T - \Theta(T, \boldsymbol{q})} + K_{\boldsymbol{q}}^{nn}(\mathrm{i}\omega_\nu),$$

де перший доданок дає внесок тільки у статичну ізотермічну сприйнятливість і його розбіжність $T - \Theta(T, \boldsymbol{q}) = 0$ визначає температуру нестійкості високотемпературної фази, а другий доданок

$$K_{\boldsymbol{q}}^{nn}(\mathrm{i}\omega_\nu) = \frac{1}{\beta}\sum_{m\sigma}\frac{1}{\chi_{\sigma\boldsymbol{q}}^{-1}(\mathrm{i}\omega_m, \mathrm{i}\omega_{m+\nu}) - \Gamma_\sigma(\mathrm{i}\omega_m, \mathrm{i}\omega_{m+\nu})}$$

відповідає ізольованій сприйнятливості (відгук Кубо) і визначає динамічну сприйнятливість. Тут $\chi_{\sigma\boldsymbol{q}}(\mathrm{i}\omega_m, \mathrm{i}\omega_{m+\nu})$ — незбурена сприйнятливість і

$$\Gamma_\sigma(\mathrm{i}\omega_m, \mathrm{i}\omega_{m+\nu}) = \frac{\Sigma_\sigma(\mathrm{i}\omega_m) - \Sigma_\sigma(\mathrm{i}\omega_{m+\nu})}{G_\sigma^{(a)}(\mathrm{i}\omega_m) - G_\sigma^{(a)}(\mathrm{i}\omega_{m+\nu})}$$

— динамічна незвідна зарядова вершина, яка у подальшому буде використана для опису непружного розсіяння світла. Інші сприйнятливості, псевдоспінова та змішана, містять тільки статичні ізотермічні внески

$$\chi_{\boldsymbol{q}}^{S^zS^z}(\mathrm{i}\omega_\nu) = \delta_{\nu 0}\frac{\Delta_{S^z}^2}{T - \Theta(T, \boldsymbol{q})}, \qquad \chi_{\boldsymbol{q}}^{nS^z}(\mathrm{i}\omega_\nu) = \chi_{\boldsymbol{q}}^{S^zn}(\mathrm{i}\omega_\nu) = \delta_{\nu 0}\frac{\Delta_{S^z}\Delta_n}{T - \Theta(T, \boldsymbol{q})}$$

і відгук Кубо для них дорівнює нулю (псевдоспінова змінна є інтегралом руху).

З метою подальшого розрахунку кореляційних функцій для потреб теорії непружного розсіяння світла у **шостому розділі** досліджено спектральні властивості багаточастинкових функцій відгуку. Запропоновано загальний підхід до отримання спектральних співвідношень для багаточасових кореляційних функцій. Особлива увага звертається на розгляд неергодичних (збережних) внесків. Зокрема для тричасових кореляційних функцій $K_{ABC}(t_1, t_2, t_3) = \langle \hat{A}(t_1)\hat{B}(t_2)\hat{C}(t_3)\rangle$ показано, що відповідна спектральна густина (фур'є-образ) містить п'ять різних внесків з різною залежністю від часу (частоти)

$$\begin{aligned} I_{ABC}(\omega_1, \omega_2, \omega_3) = \big[&\tilde{I}_{ABC}(\omega_1, \omega_2, \omega_3) + \delta(\omega_1)\tilde{I}_{ABC}(\circ, -\omega_3, \omega_3) + \delta(\omega_2)\tilde{I}_{ABC}(\omega_1, \circ, -\omega_1) \\ &+ \delta(\omega_3)\tilde{I}_{ABC}(-\omega_2, \omega_2, \circ) + \delta(\omega_1)\delta(\omega_2)\tilde{I}_{ABC}(\circ, \circ, \circ)\big]\Delta(\omega_1 + \omega_2 + \omega_3), \end{aligned}$$

де останні чотири внески включають ненульові матричні елементи між квантовими станами з однаковою енергією (неергодичні внески). Аналогічну структуру мають тричасові температурні функції Гріна $K_c(\tau_1,\tau_2,\tau_3) = \langle \mathcal{T} \hat{A}(\tau_1)\hat{B}(\tau_2)\hat{C}(\tau_3)\rangle$, зокрема для фур'є-образу після аналітичного продовження $\mathrm{i}\nu_\alpha \to z_\alpha$ отримуємо

$$K_c(z_1,z_2,z_3) = \frac{\beta^2}{2}\Delta(z_1)\Delta(z_2)\Delta(z_3)\widetilde{K}_c(\circ,\circ,\circ) + \beta\Delta(z_1)\Delta(z_2+z_3)\widetilde{K}_c(\circ,z_2,z_3)$$
$$+ \beta\Delta(z_2)\Delta(z_3+z_1)\widetilde{K}_c(z_1,\circ,z_3) + \beta\Delta(z_3)\Delta(z_1+z_2)\widetilde{K}_c(z_1,z_2,\circ)$$
$$+ \Delta(z_1+z_2+z_3)\widetilde{K}_c(z_1,z_2,z_3),$$

де кожен з внесків виражається через відповідні спектральні густини і характеризується своїм набором розрізів у комплексній площині. Тому операції аналітичного продовження до дійсної вісі $z_\alpha \to \omega_\alpha \pm \mathrm{i}\delta$ для різних частотних аргументів не комутують між собою, що дозволило розв'язати обернену задачу — виразити спектральні густини через відомі функції Гріна.

Використовуючи спектральні властивості багаточасових кореляційних функцій, узагальнено теорему Джонсона-Магана [Jonson M., Mahan G.D. *Phys. Rev. B*, 1990, **42**, 9350] на випадок багатошарових наноструктур. В загальному, перенос електричного заряду і тепла (електронний внесок) через шарувату структуру описується чотирма узагальненими поляризованостями — фур'є-образами кореляційних функцій $\bar{L}_{11\alpha\beta}(\tau) = \langle \mathcal{T}_\tau j_\alpha(\tau) j_\beta(0)\rangle$, $\bar{L}_{12\alpha\beta}(\tau) = \langle \mathcal{T}_\tau j_\alpha(\tau) j^{\mathrm{Q}}_\beta(0)\rangle$, $\bar{L}_{21\alpha\beta}(\tau) = \langle \mathcal{T}_\tau j^{\mathrm{Q}}_\alpha(\tau) j_\beta(0)\rangle$ та $\bar{L}_{22\alpha\beta}(\tau) = \langle \mathcal{T}_\tau j^{\mathrm{Q}}_\alpha(\tau) j^{\mathrm{Q}}_\beta(0)\rangle$, де j_α і j^{Q}_α — оператори електричного струму та теплового потоку, які проходять через атомну площину α. Використовуючи означення операторів потоку заряду і тепла та спектральні зображення для багаточасових кореляційних функцій, отримано, що стаціонарний відгук для усіх узагальнених поляризованостей

$$L_{ij\alpha\beta} = \pi\beta \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}\omega_2 \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}\omega_4 I_{\alpha\beta}(-\omega_2,\omega_2,-\omega_4,\omega_4)\omega_2^{i-1}\omega_4^{j-1}$$

виражається через одну спектральну густину

$$I_{\alpha\beta}(-\omega_2,\omega_2,-\omega_4,\omega_4) = -2a^2 t^{\perp}_{\alpha\alpha+1} t^{\perp}_{\beta\beta+1} \sum_{i\in\text{plane}} \sum_{j\in\text{plane}}$$
$$\times \operatorname{Re}\left[I_{c^\dagger_{\alpha+1i}c_{\alpha i}c^\dagger_{\beta+1j}c_{\beta j}}(-\omega_2,\omega_2,-\omega_4,\omega_4) - I_{c^\dagger_{\alpha+1i}c_{\alpha i}c^\dagger_{\beta j}c_{\beta+1j}}(-\omega_2,\omega_2,-\omega_4,\omega_4)\right],$$

що узагальнює теорему Джонсона-Магана для наноструктур: підінтегральні вирази для потокових кореляційних функцій заряд-заряд, тепло-заряд, заряд-тепло і тепло-тепло відрізняються тільки частотними множниками.

Сьомий розділ присвячений побудові теорії комбінаційного розсіяння світла на електронних збудженнях у сильноскорельованих матеріалах. У загальному, переріз непружного розсіяння світла визначається виразом

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

де $\Omega=\omega_i-\omega_f$ і $\boldsymbol{q}=\boldsymbol{k}_i-\boldsymbol{k}_f$ — передана енергія та імпульс, відповідно, а $\omega_{i(f)}$, $\boldsymbol{k}_{i(f)}$ і $\boldsymbol{e}^{i(f)}$ позначають енергію, імпульс і поляризацію початкового (кінцевого) стану фотонів, $\varepsilon_{i(f)}$ відповідає власним станам речовини і $g(\boldsymbol{q})$ — "амплітуда розсіяння". Оператор розсіяння на колективізованих електронах $\hat{M}(\boldsymbol{q})$ містить як нерезонансні, так і резонансні (залежні від частоти світла) внески [Shastry B.S., Shraiman B.I. *Phys. Rev. Lett.*, 1990, **65**, 1068], а переріз розсіяння містить три доданки

$$R(\boldsymbol{q},\Omega)=\frac{2\pi g^2(\boldsymbol{k}_i)g^2(\boldsymbol{k}_f)}{1-\exp(-\beta\Omega)}\left[\chi_N(\boldsymbol{q},\Omega)+\chi_M(\boldsymbol{q},\Omega)+\chi_R(\boldsymbol{q},\Omega)\right],$$

які відповідають нерезонансному, змішаному та резонансному відгуку. Використовуючи аналітичні властивості багаточасових кореляційних функцій, отримано загальні вирази, які пов'язують функції відгуку непружного розсіяння з аналітично продовженими багаточасовими температурними функціями Гріна, а саме, нерезонансний відгук $\chi_N(\boldsymbol{q},\Omega)=\operatorname{Im}\chi^{(2)}_{\tilde{\gamma},\tilde{\gamma}}(-\Omega-\mathrm{i}\delta,\Omega+\mathrm{i}\delta)/2\pi\mathrm{i}$ отримується з двочасової функції $\chi^{(2)}_{\tilde{\gamma},\tilde{\gamma}}(\tau,\tau')=\langle\mathcal{T}_\tau\tilde{\gamma}(\tau)\tilde{\gamma}(\tau')\rangle$, змішаний відгук

$$\begin{aligned}\chi_M(\boldsymbol{q},\Omega)=\frac{1}{2\pi\mathrm{i}}\Big[&\chi^{(3)}_{\tilde{\gamma},f,i}(-\Omega-\mathrm{i}\delta,-\omega_f+\mathrm{i}\delta,\omega_i-\mathrm{i}\delta)-\chi^{(3)}_{\tilde{\gamma},f,i}(-\Omega+\mathrm{i}\delta,-\omega_f+\mathrm{i}\delta,\omega_i-\mathrm{i}\delta)\\&+\chi^{(3)}_{\tilde{\gamma},f,i}(\Omega+\mathrm{i}\delta,\omega_f+\mathrm{i}\delta,-\omega_i-\mathrm{i}\delta)-\chi^{(3)}_{\tilde{\gamma},f,i}(\Omega-\mathrm{i}\delta,\omega_f+\mathrm{i}\delta,-\omega_i-\mathrm{i}\delta)\Big]\end{aligned}$$

— з тричасової функції $\chi^{(3)}_{\tilde{\gamma},f,i}(\tau,\tau',\tau'')=\left\langle\mathcal{T}_\tau\tilde{\gamma}(\tau)j^{(f)}(\tau')j^{(i)}(\tau'')\right\rangle$ і резонансний

$$\chi_R(\boldsymbol{q},\Omega)=\frac{1}{2\pi\mathrm{i}}\,\chi^{(4)}_{i,f,f,i}(z_1,z_2,z_3,z_4)\Bigg|^{z_3+z_4=-z_1-z_2\to\Omega+\mathrm{i}\delta}_{z_3+z_4=-z_1-z_2\to\Omega-\mathrm{i}\delta}\Bigg|_{\substack{z_1\to-\omega_i-\mathrm{i}\delta\\ z_2\to\omega_f+\mathrm{i}\delta\\ z_3\to-\omega'_f+\mathrm{i}\delta\\ z_4\to\omega'_i-\mathrm{i}\delta}}\Bigg|_{\substack{\omega'_i-\omega_i\to0\\ \omega'_f-\omega_f\to0}}$$

— з чотиричасової функції $\chi^{(4)}_{i,f,f,i}(\tau_1,\tau_2,\tau_3,\tau_4)=\left\langle\mathcal{T}_\tau j^{(i)}(\tau_1)j^{(f)}(\tau_2)j^{(f)}(\tau_3)j^{(i)}(\tau_4)\right\rangle$, де $\tilde{\gamma}=\sum_{\alpha\beta}e^i_\alpha\gamma_{\alpha,\beta}(\boldsymbol{q})e^f_\beta$, $j^{(i)}=\sum_\alpha e^i_\alpha j_\alpha(-\boldsymbol{k}_i)$ і $j^{(f)}=\sum_\alpha e^f_\alpha j_\alpha(\boldsymbol{k}_f)$ відповідають згортці векторів поляризації світла з операторами струму $j_\alpha(\boldsymbol{q})=\sum_{\boldsymbol{k}}\frac{\partial\epsilon(\boldsymbol{k})}{\partial k_\alpha}c^\dagger_\sigma(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}/2)c_\sigma(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}/2)$ і тензором напружень $\gamma_{\alpha,\beta}(\boldsymbol{q})=\sum_{\boldsymbol{k}}\frac{\partial^2\epsilon(\boldsymbol{k})}{\partial k_\alpha\partial k_\beta}c^\dagger_\sigma(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}/2)c_\sigma(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}/2)$. У загальному, розрахунок багаточасових функцій Гріна вимагає знання багаточастинкових зарядових вершин, але нами показано, що в границі нескінченої вимірності більшість з перенормованих багаточастинкових вершин пропадають (занулюються усі тричастинкові і чотиричастинкові вершини і присутні тільки двочастинкові вершини) і в рамках теорії ДСП розрахунок усіх сприйнятливостей суттєво спрощується. Зокрема отримано, що функція відгуку для симетрії B_{2g} містить тільки резонансні внески, для симетрії B_{1g} — нерезонансні і резонансні, і для симетрії A_{1g} присутні усі внески: нерезонансні, змішані і резонансні.

Оскільки незвідна двочастинкова зарядова вершина відома тільки для моделі Фалікова-Кімбала, то саме для неї були проведені розрахунки повної функції відгуку для комбінаційного розсіяння світла. Отримано, що у резонансному режимі стоксівський відгук набагато більший за антистоксівський, оскільки відбувається сильне наростання сигналу внаслідок ефектів подвійного резонансу, коли передана енергія наближається до енергії налітаючих фотонів. Також було встановлено, що при $T \to 0$ відгук стає різкішим з наростанням спектральної інтенсивності при низьких температурах, за винятком низькоенергетичного термічно активованого відгуку для діелектричної фази. Тому, в основному, розглядалися випадки низьких і помірних температур, оскільки для них відгук комбінаційного розсіяння більший. Досліджено як змінюється функція відгуку комбінаційного розсіяння для різних симетрій при зростанні величини кулонівської взаємодії і переході від слабонеідеального металу до сильно розсіюючого металу і сильноскорельованого діелектрика (див. рис. 9).

Резонансні ефекти проявляються різним чином у різних геометріях розсіяння, що відповідає різній симетрії зарядових збуджень, на яких розсіюється світло, та різному екрануванню нерезонансних, змішаних і резонансних внесків ефектами двочастинкового перенормування (див. рис. 9г). Отримано, що відгук комбінаційного розсіяння сильно наростає поблизу області т.зв. подвійного резонансу, коли одночасно занулюються декілька знаменників функцій Гріна. В загальному, ефекти резонансу можуть приводити до наростання відгуку на порядок величини і більше у порівнянні з нерезонансним відгуком, особливо коли частота налітаючих фотонів трохи більша за енергію піків нерезонансного відгуку. Крім того отримано, що для резонансного відгуку також спостерігається ізосбестична поведінка (рис. 10), у тому числі і для симетрій A_{1g} і B_{2g}, особливо коли енергія налітаючих фотонів порядку енергії взаємодії.

Резонансні ефекти, особливо коли частота налітаючих фотонів близька до U, приводять до посилення відгуку в низькоенергетичній і високоенергетичній частині спектру по різному і тому було детально досліджено особливості резонансного посилення у різних частинах спектру. На рис. 11 наведені повні профілі відгуку комбінаційного розсіяння при різних значеннях переданої частоти Ω у залежності від частоти налітаючих фотонів ω_i для $U = 3$. Якщо значення Ω більше за енергію міжзонних зарядових збуджень ($\Omega > U$) то спостерігається тільки подвійний резонанс при $\omega_i = \Omega$. При зменшенні Ω спостерігається резонансне посилення піку переносу заряду коли $\omega_i \approx U$. Розміщення цього піку змінюється, а його інтенсивність зменшується при подальшому зниженні переданої частоти, але він відновлюється, коли Ω досягає області низькоенергетичного піку, і проявляє

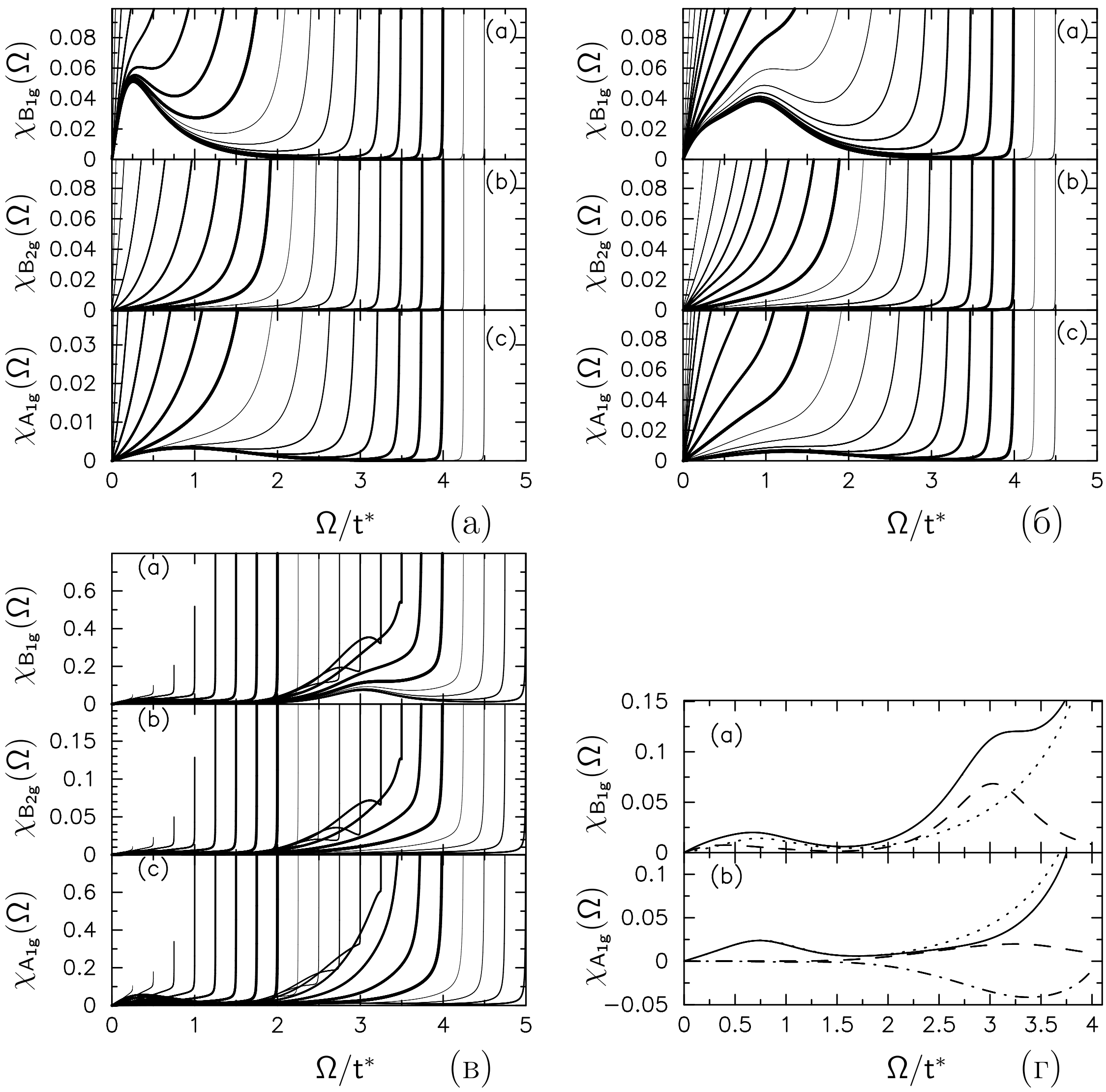


Рис. 9. Функція відгуку для випадку (а) слабонеідеального металу $U = 0.5$, $T = 0.05$, (б) сильно розсіюючого металу $U = 1.0$, $T = 0.5$ і (в) сильноскорельованого діелектрика $U = 3.0$, $T = 1.0$. Криві приведено у залежності від переданої частоти для частот налітаючих фотонів у межах від 0.25 до 4.5 з кроком 0.25. Різні внески у відгук для $U = 3$, $T = 1.0$ і $\omega_i = 4.0$ зображено на панелі (г): суцільна лінія — повний відгук, точкова — резонансний, штрихова — нерезонансний і штрих-точкова — змішаний.

двопікову структуру для симетрій B_{1g} та B_{2g}. Тобто отримуємо одночасний резонанс піку переносу заряду і низькоенергетичного піку, коли низькоенергетичні структури на спектрі посилюються при збудженні високоенергетичним фотоном, який попадає у резонанс з високоенергетичними міжзонними переходами.

Восьмий розділ присвячений динаміці локалізованих збуджень та резонансному непружному розсіянню рентгенівських променів. Отримано нове представлення для спектральної функції f-електронів моделі Фалікова-Кімбала, яке альтернативне оригінальному представленню Брандта і Урбанека [Brandt U., Urbanek M.P. *Z. Phys. B*, 1992, **89**, 297]. У новому представленні розрахунки виконуються тільки на дійсній часовій вісі, що дозволяє розглядати якзавгодно низькі

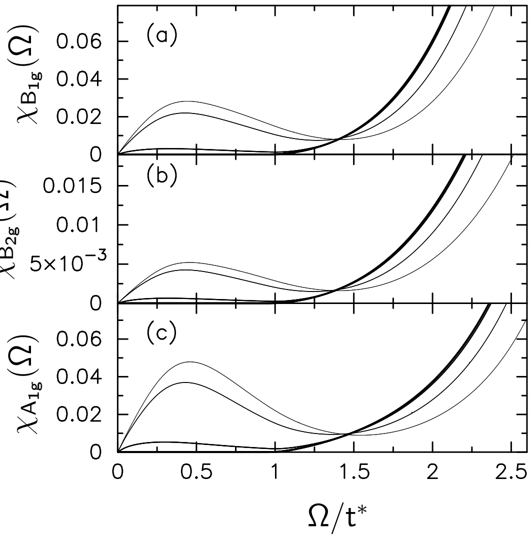


Рис. 10. Ізосбестична поведінка комбінаційного розсіяння для $U = 3$ та $\omega_i = 3.5$. Приведено криві для $T = 1$, 0.5, 0.2 і 0.05 (товстіші лінії відповідають нижчим температурам).

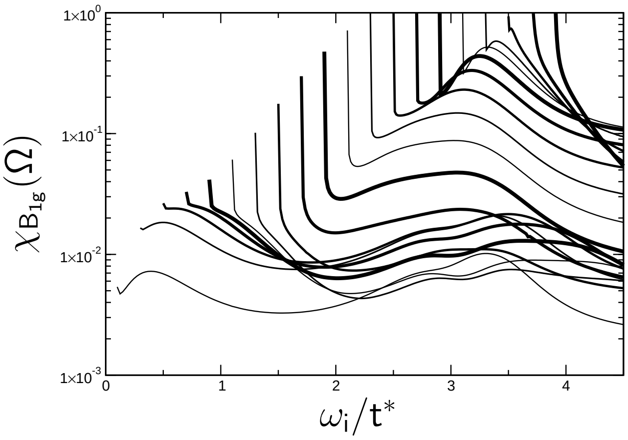


Рис. 11. Функція відгуку комбінаційного розсіяння для різних значень переданої частоти Ω з кроком 0.2 у залежності від частоти налітаючих фотонів ω_i для $T = 0.5$ та $U = 3$. Усі криві починаються при значенні $\omega_i = \Omega$.

температури. Загальний вираз для запізнюючої функції Гріна включає два детермінанти неперервних матричних операторів зі структурою типу Тепліца

$$G_f^r(\omega) = -\mathrm{i}\int_0^{+\infty} \mathrm{d}t \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega+\mu-E_f)t} \left\{ w_0 \det\nolimits_{[0,t]} \|\mathbf{I} - \mathbf{G}_0 U\| + w_1 \left(\det\nolimits_{[0,t]} \|\mathbf{I} + \mathbf{G}_1 U\| \right)^* \right\},$$

де функціональні детермінанти розраховуються на інтервалі $[0, t]$, а елементи функціональних матриць [часово-впорядковані функції Гріна для підпросторів з пустим та заселеним f-станом ($\alpha = 0$ і 1)] залежать тільки від різниці часів.

Застосовуючи дискретний підхід Вінера-Гопфа і теорему Сеґе, отримано точні аналітичні формули для довгочасової поведінки функцій Гріна. Встановлено, що для малих значень взаємодії ($U < 0.866t^*$) результати точного розрахунку функціональних визначників дуже швидко виходять на асимптотичний результат методу Вінера-Гопфа: експоненційне загасання з часом при скінчених температурах, яке при $T \to 0$ змінюється на степеневе. Відповідно, на густині станів при скінчених температурах спостерігається лоренцівський пік, який при $T \to 0$ перетворюється у степеневу сингулярність (катастрофа ортогональності Андерсона). Для більших значень взаємодії $0.866t^* < U < U_c = t^*\sqrt{2}$ при високих температурах завжди спостерігається перетин вісі абсцис, який з пониженням температури зміщується до великих часів і виходить на експоненційне загасання для проміжних значень t і при $T = 0$ спостерігається кросовер до степеневого загасання, коли точка перетину відходить на безмежність. На густині станів це відповідає кросоверу від псевдощілинної двопікової структури до степеневої сингулярності. Для $U > U_c$ ніколи не відбувається виходу на асимптотичний режим і для довіль-

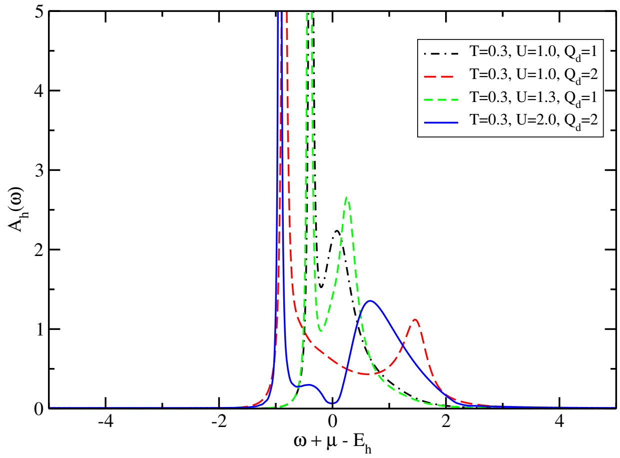


Рис. 12. Рентгенівські фотоемісійні спектри при половинному заповненні $n_d = n_f = 1/2$.

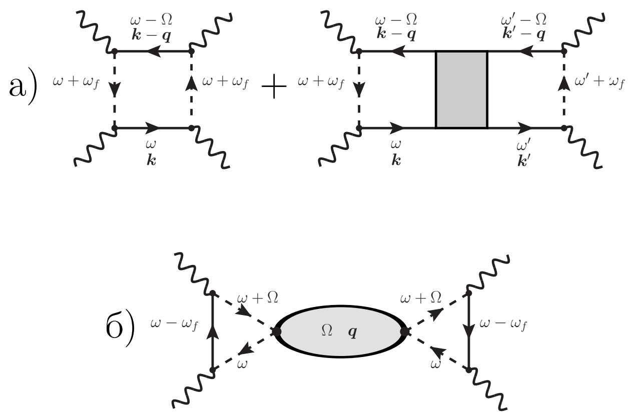


Рис. 13. Процеси (а) прямого та (б) непрямого непружного розсіяння рентгенівських променів.

ної температури завжди існує щілина на густині станів.

У другій частині розділу розраховано функції Гріна для дірок у йонному залишку, які виникають при поглинанні рентгенівських фотонів, з врахуванням локальної кулонівської взаємодії глибоко лежачої дірки йонного залишку ($n_h = h^\dagger h$, $E_h - \mu \gg U, t$) з d та f частинками моделі Фалікова-Кімбала

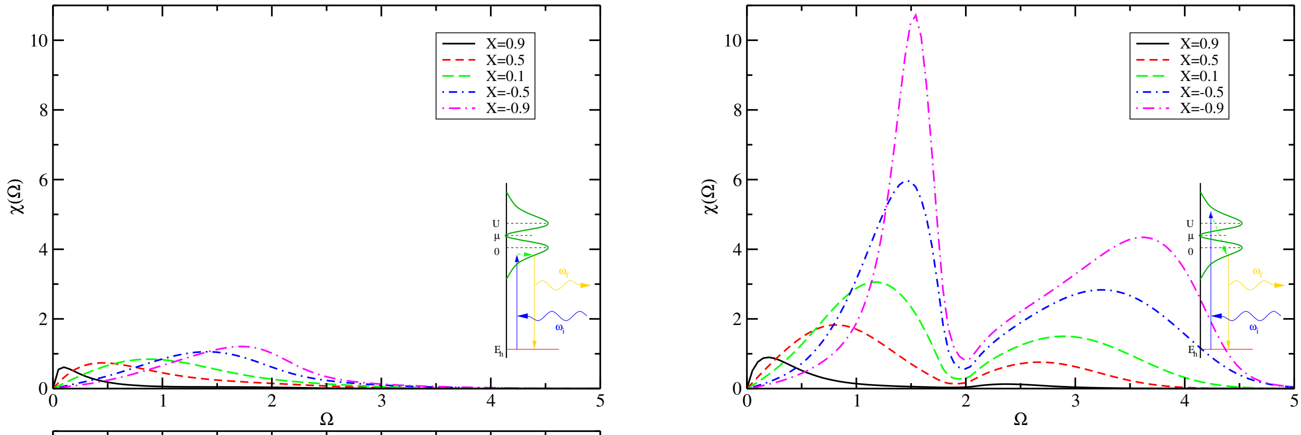
$$H_{\mathrm{loc}} = U n_d n_f + Q_d n_d n_h + Q_f n_f n_h + E_f n_f + E_h n_h - \mu \left(n_d + n_f + n_h \right).$$

Хвильова функція стану йонного залишку сильно локалізована і не перекривається з орбіталями сусідніх іонів і за своїми властивостями подібна до f-стану моделі Фалікова-Кімбала. Розрахунок пропагатора дірки у цьому стані виконувався зовсім аналогічно і для запізнюючої функції Гріна в границі дуже великої енергії дірки отримано вираз з двома функціональними детермінантами

$$G_h^r(\omega) = -\mathrm{i} \int\limits_0^{+\infty} dt e^{\mathrm{i}(\omega+\mu-E_h)t} \left\{ w_0 \det_{[0,t]} \| I - Q_d G_{00} \| + w_1 e^{-\mathrm{i}Q_f t} \det_{[0,t]} \| I - Q_d G_{01} \| \right\}.$$

Пропагатор дірки у йонному залишку описує процеси рентгенівської фотоемісії [Nozières P., De Dominicis C. *Phys. Rev.*, 1969, **178**, 1097] і на рис. 12 приведені відповідні спектри. Отримано, що спектр рентгенівської фотоемісії містить дві групи піків, причому одна з них завжди відповідає гострому піку крайового поглинання.

В подальшому, отримані пропагатори дірок у йонному залишку використані для розрахунку спектрів резонансного непружного розсіяння рентгенівських променів. Проаналізовано діаграмні ряди та виділено основні діаграми, які дають внесок у процеси прямого та непрямого розсіяння з передачею імпульсу (рис. 13). Досліджено їхні залежності від переданої енергії та імпульсу і для різних енергій налітаючих фотонів (рис. 14). Отримано, що при малих (передпорогових) зна-



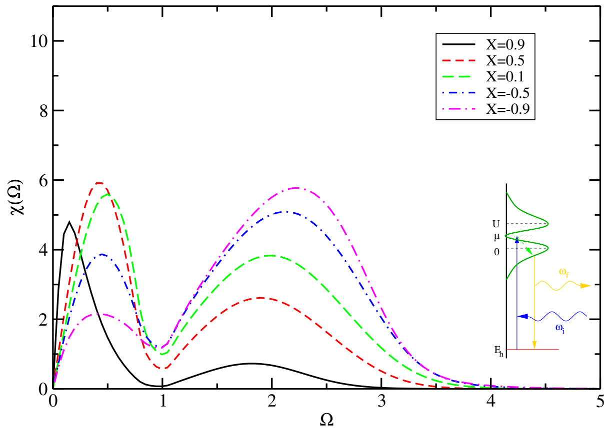


Рис. 14. Функції відгуку для резонансного непружного розсіяння рентгенівських променів для різних енергій фотонів: $\omega_i + \mu - E_h = -1$, 0 та 1. Залежність від переданого імпульсу $\boldsymbol{q} = \boldsymbol{k}_i - \boldsymbol{k}_f$ входить через величину $X(\boldsymbol{q}) = \frac{1}{D}\sum_\alpha \cos q_\alpha$ ($U = Q_d = 2$, $T = 0.6$).

ченнях енергії збудження $\omega_i < E_h - \mu$, коли електрон з рівня йонного залишку закидається у область заповнених валентних станів нижче рівня хімічного потенціалу, відповідний відгук непружного розсіяння слабкий. При збільшенні енергії фотонів $\omega_i \geqslant E_h - \mu$ збуджений електрон попадає в область вільних станів, що приводить до суттєвого зростання відгуку. При прямих процесах розсіяння утворена після рекомбінації електрон-діркова пара зазнає багатократного розсіяння та релаксації і може охопити усі доступні для неї стани у валентній зоні, а відповідні спектри непружного розсіяння містять інформацію про багаточастинкову динаміку валентних зон, напр., існування моттівської щілини для випадку сильноскорельованого діелектрика (рис. 14).

ОСНОВНІ РЕЗУЛЬТАТИ ТА ВИСНОВКИ

1. В рамках підходу сильного зв'язку отримано самоузгоджений опис динамічних та термодинамічних властивостей моделей типу бінарного сплаву (спрощена псевдоспін-електронна модель та модель Фалікова-Кімбала). Доведено еквівалентність виразів Фалікова-Кімбала-Плішке та Брандта-Мільша для вільної енергії. Порівняння з результатами теорії ДСП показало застосовність УНХФ до опису термодинаміки таких моделей при великих значеннях взаємодії.

2. Показано, що діаграми ряду теорії збурень для термодинамічного потенціалу в підході сильного зв'язку складаються з локальних вершин, які з'єднані лініями переносу. Незбурені локальні вершини (багаточастинкові функції Гріна) містять внески від підпросторів з різними багаточастинковими вакуумними станами та відповідними збудженнями відносно цих вакуумних станів. В рамках теорії динамічного середнього поля задача точно розпадається на окремі задачі для підпросторів.
3. Запропоновано метод розрахунку динамічних та термодинамічних величин у підході сильного зв'язку теорії динамічного середнього поля. Показано, яким чином будувати різного роду самоузгоджені наближення. В рамках наближення типу Хартрі-Фока отримано, що модель Хаббарда описує "багатокомпонентну" електронну систему: фермі-рідинна для малих концентрацій електронів чи дірок з феромагнітним основним станом і не-фермі-рідинну поблизу половинного заповнення з антиферомагнітним основним станом.
4. Побудовано теорію динамічного середнього поля для систем з корельованим переносом і показано, що це можна зробити в матричному узагальненні підходу сильного зв'язку. Отримано функціонал типу Бейма-Каданова для підходу сильного зв'язку та розроблено відповідну варіаційну схему розрахунку середніх значень та сприйнятливостей. Отримано точні розв'язки для моделі Фалікова-Кімбала з корельованим переносом та виявлено перехід Мотта при зміні температури.
5. Розроблено загальну схему сильного зв'язку для розрахунку динамічних сприйнятливостей. Встановлено, що в узагальненому наближенні хаотичних фаз врахування кулонівської взаємодії між електронами приводить до появи релаксаційної моди дебаївського типу при наближенні до точки втрати стійкості високотемпературної фази. Отримано загальні співвідношення для незвідних вершин і багаточасових функцій Гріна у теорії динамічного середнього поля. Для моделей типу бінарного сплаву знайдено аналітичні вирази для незвідної зарядової вершини та динамічних сприйнятливостей, як ізотермічних, так і ізольованих (відгук Кубо).
6. Запропоновано спосіб отримання спектральних співвідношень для багаточасових кореляційних функцій з врахуванням неергодичних (збережних) внесків. Знайдено представлення тричасових функцій Гріна через спектральні густини і розв'язано обернену задачу — вираження спектральних густин через відомі функції Гріна. Використовуючи спектральні властивості багаточасових кореляційних функцій, узагальнено теорему Джонсона-Магана, яка дає зв'язок між коефіцієнтами переносу електричного заряду і тепла, на випадок багатошарових наноструктур.
7. Побудовано загальний формалізм аналітичного продовження багаточасових

температурних функцій Гріна для отримання нерезонансних, змішаних та резонансних внесків у переріз комбінаційного розсіяння світла на електронних збудженнях.

8. У рамках теорії динамічного середнього поля отримано точні розв'язки для резонансного комбінаційного розсіяння світла для моделі Фалікова-Кімбала. Досліджено вплив ефектів подвійного резонансу на перебудову спектрів розсіяння, резонансних профілів та ізосбестичну поведінку.
9. Запропоновано нове представлення для спектральної функції локалізованих збуджень (напр. дірки в йонному залишку при поглинанні рентгенівського кванта) через детермінанти неперервних матричних операторів типу Тепліца. Використовуючи підхід Вінера-Гопфа, отримано аналітичну асимптотику для довгочасової поведінки функцій Гріна.
10. Отримано, що спектри рентгенівської фотоемісії для моделі Фалікова-Кімбала містять дві групи піків, причому один з них — гострий пік краю поглинання. Досліджено перебудову спектрів резонансного непружного розсіяння рентгенівських променів для різних значень переданого імпульсу та різних енергій збудження (менших і більших за поріг поглинання).

СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ

1. *Stasyuk, I. V.* Dielectric instabilities and phase transitions in pseudospin-electron model of HTSC systems / I. V. Stasyuk, A. M. Shvaika // *Физика низких температур.* — 1996. — Т. 22, № 5. — С. 535–538.
2. *Stasyuk, I. V.* Dielectric, charge and phase-separation instabilities in pseudospin-electron model of high-T_c superconductors / I. V. Stasyuk, A. M. Shvaika // *Czechoslovak Journal of Physics.* — 1996. — Vol. 46, no. S2. — Pp. 961–962.
3. *Stasyuk, I. V.* Dielectric instability and vibronic-type spectrum of local anharmonic model of high-T_c superconductors / I. V. Stasyuk, A. M. Shvaika // *Ferroelectrics.* — 1997. — Vol. 192, no. 1–4. — Pp. 1–10.
4. *Stasyuk, I. V.* Pseudospin-electron model in infinite dimensions / I. V. Stasyuk, A. M. Shvaika // *Journal of Physical Studies.* — 1999. — Vol. 3, no. 2. — Pp. 177–183.
5. *Stasyuk, I. V.* Thermodynamics of a pseudospin-electron model without correlations / I. V. Stasyuk, A. M. Shvaika, K. V. Tabunshchyk // *Condensed Matter Physics.* — 1999. — Vol. 2, no. 1. — Pp. 109–132.
6. *Stasyuk, I. V.* Thermodynamics of pseudospin-electron model in the $U = 0$ limit / I. V. Stasyuk, A. M. Shvaika, K. V. Tabunshchyk // *Acta Physica Polonica A.* — 2000. — Vol. 97, no. 3. — Pp. 411–414.
7. *Stasyuk, I. V.* Self-consistent approach for the thermodynamics of a simplified

pseudospin-electron model / I. V. Stasyuk, A. M. Shvaika, K. V. Tabunshchyk // *Ukrainian Journal of Physics.* — 2000. — Vol. 45, no. 4–5. — Pp. 520–528.

8. *Shvaika, A. M.* Strong-coupling approach for strongly correlated electron systems / A. M. Shvaika // *Physical Review B.* — 2000. — Vol. 62, no. 4. — Pp. 2358–2371.
9. *Shvaika, A. M.* Dynamical susceptibilities in a strong coupling approach / A. M. Shvaika // *Physica C: Superconductivity.* — 2000. — Vol. 341–348, no. 1. — Pp. 177–178.
10. *Shvaika, A. M.* Strong coupling Hartree-Fock approximation in the dynamical mean-field theory / A. M. Shvaika // *Condensed Matter Physics.* — 2001. — Vol. 4, no. 1. — Pp. 85–92.
11. *Shvaika, A. M.* An analytical strong coupling approach in dynamical mean-field theory / A. M. Shvaika // *Acta Physica Polonica B.* — 2001. — Vol. 32, no. 13. — Pp. 3415–3420.
12. *Shvaika, A. M.* Dynamical susceptibilities in strong coupling approach: General scheme and Falicov-Kimball model / A. M. Shvaika // *Journal of Physical Studies.* — 2001. — Vol. 5, no. 3/4. — Pp. 349–354.
13. *Stasyuk, I. V.* Strong coupling approach in dynamical mean-field theory for strongly correlated electron systems / I. V. Stasyuk, A. M. Shvaika // *Ukrainian Journal of Physics.* — 2002. — Vol. 47, no. 10. — Pp. 975–1000.
14. *Shvaika, A. M.* Dynamical mean field theory of correlated hopping / A. M. Shvaika // *Acta Physica Polonica B.* — 2003. — Vol. 34, no. 2. — Pp. 803–806.
15. *Shvaika, A. M.* Correlated hopping in infinite dimensions: rigorous local approach / A. M. Shvaika // *physica status solidi (b).* — 2003. — Vol. 236, no. 2. — Pp. 368–371.
16. *Shvaika, A. M.* Dynamical mean-field theory of correlated hopping: A rigorous local approach / A. M. Shvaika // *Physical Review B.* — 2003. — Vol. 67, no. 7. — P. 075101. — [12 pages].
17. *Shvaika, A. M.* Equivalence of the Falicov-Kimball and Brandt-Mielsch forms for the free energy of the infinite-dimensional Falicov-Kimball model / A. M. Shvaika, J. K. Freericks // *Physical Review B.* — 2003. — Vol. 67, no. 15. — P. 153103. — [3 pages].
18. Resonant enhancement of inelastic light scattering in strongly correlated materials / A. M. Shvaika, O. Vorobyov, J. K. Freericks, T. P. Devereaux // *Physical Review Letters.* — 2004. — Vol. 93, no. 13. — P. 137402. — [4 pages].
19. Electronic Raman scattering in correlated materials: A treatment of nonresonant, mixed, and resonant scattering using dynamical mean-field theory / A. M. Shvaika, O. Vorobyov, J. K. Freericks, T. P. Devereaux // *Physical Review B.* — 2005. — Vol. 71, no. 4. — P. 045120. — [17 pages].
20. Resonant electronic Raman scattering near a quantum critical point / A. M. Shvaika, O. Vorobyov, J. K. Freericks, T. P. Devereaux // *Physica B: Condensed Mat-*

ter. — 2005. — Vol. 359–361. — Pp. 705–707.
21. Resonant enhancement of electronic Raman scattering / A. M. Shvaika, O. Vorobyov, J. K. Freericks, T. P. Devereaux // *Journal of Physics and Chemistry of Solids.* — 2006. — Vol. 67, no. 1–3. — Pp. 336–339.
22. *Shvaika, A. M.* On the spectral relations for multitime correlation functions / A. M. Shvaika // *Condensed Matter Physics.* — 2006. — Vol. 9, no. 3(47). — Pp. 447–458.
23. *Matveev, O. P.* Charge and magnetic states for the Hubbard model on a three-site cluster / O. P. Matveev, A. M. Shvaika // *Journal of Physical Studies.* — 2006. — Vol. 10, no. 3. — Pp. 208–219.
24. *Freericks, J. K.* Electronic thermal transport in strongly correlated multilayered nanostructures / J. K. Freericks, V. Zlatić, A. M. Shvaika // *Physical Review B.* — 2007. — Vol. 75, no. 3. — P. 035133. — [16 pages].
25. *Shvaika, A. M.* F-electron spectral function of the Falicov-Kimball model and the Wiener-Hopf sum equation approach / A. M. Shvaika, J. K. Freericks // *Condensed Matter Physics.* — 2008. — Vol. 11, no. 3. — Pp. 425–442.
26. *Швайка, А. М.* Спектри фотоемісії та резонансне непружне розсіяння Рентґенових променів / А. М. Швайка, Т. С. Мисакович, Дж. Фрірікс. — Львів, 2010. — 21 с. — (Препр./ НАН України. Ін-т фізики конденсованих систем; ICMP–10–10U).
27. *Shvaika, A. M.* An analytical strong coupling approach for strongly correlated electron systems / A. M. Shvaika // Fundamental and Applied Problems of Modern Physics. Proceedings of 2nd International Smakula Symposium. — Ternopil: Dzhura, 2000. — Pp. 84–85.
28. *Shvaika, A. M.* Low-frequency dynamics of model with local anharmonicity in the theory of high-T_c superconductors / A. M. Shvaika // Programme and Abstracts of the International Workshop on Statistical Physics and Condensed Matter Theory. — Lviv (Ukraine): 1995. — September 11–14. — P. 90.
29. *Shvaika, A. M.* Correlation functions and thermodynamics of pseudospin-electron model in large dimensions / A. M. Shvaika, I. V. Stasyuk // Abstracts of the International School "Strongly Correlated Systems and Critical Phenomena". — Dubna (Russia): 1997. — August 26–September 5. — P. 44.
30. *Shvaika, A. M.* Pseudospin-electron model of high-T_c superconductors in large dimensions / A. M. Shvaika // Programme and Abstracts of the INTAS-Ukraine Workshop on Condensed Matter Physics. — Lviv (Ukraine): 1998. — May 21–24. — P. 124.
31. *Stasyuk, I. V.* Strong coupling approach in dynamical mean-field theory / I. V. Stasyuk, A. M. Shvaika // Abstracts of the European Conference "Physics of Magnetism 99". — Poznan (Poland): 1999. — June 21–25. — P. 65.
32. *Shvaika, A. M.* Strong coupling Hartree-Fock approximation in the dynamical

mean-field theory / A. M. Shvaika // Book of Abstracts of the Workshop on Modern Problems of Soft Matter Theory. — Lviv (Ukraine): 2000. — August 27–31. — P. 103.

33. *Stasyuk, I. V.* Strong coupling approach in dynamical mean-field theory / I. V. Stasyuk, A. M. Shvaika // Abstracts, Programme, Information of 2nd Inter. Pamporovo Workshop on Cooperative Phenomena in Condensed Matter: Quantum Phases and Phase Transitions. — Pamporovo (Bulgaria): 2001. — July 28–August 7. — P. 23.
34. *Shvaika, A. M.* Correlated hopping in infinite dimensions: Rigorous local approach / A. M. Shvaika // Abstracts of the European Conference "Physics of Magnetism'02". — Poznan (Poland): 2002. — July 1–5. — P. 37.
35. *Shvaika, A. M.* Spin and charge fluctuations in the dynamical mean field theory of strongly correlated electron systems / A. M. Shvaika // Abstracts of the European Conference "Physics of Magnetism'02". — Poznan (Poland): 2002. — July 1–5. — P. 37.
36. *Shvaika, A. M.* Dynamical mean-field theory of correlated hopping: Rigorous local approach / A. M. Shvaika // Book of Abstracts of the International Conference on Strongly Correlated Electron Systems (SCES'02). — Krakow (Poland): 2002. — July 10–13. — P. 240.
37. Electronic Raman scattering in correlated materials: exact treatment of nonresonant, mixed, and resonant scattering with dynamical mean field theory / A. M. Shvaika, O. Vorobyov, J. K. Freericks, T. P. Devereaux // Bulletin of the American Physical Society: Annual APS March Meeting 2004. — Montreal (Canada), 2004. — March 22–26. — Vol. 49, No 1, part 2. — P. 1071.
38. Resonant enhancement of electronic Raman scattering / A. M. Shvaika, O. Vorobyov, J. K. Freericks, T. P. Devereaux // Book of Abstracts of the 7th International Conference on Spectroscopies of Novel Superconductors (SNS'2004). — Barcelona-Sitges (Spain): 2004. — July 11–16. — PO 37.
39. Exact treatment of electronic Raman scattering with dynamical mean-field theory / A. M. Shvaika, O. Vorobyov, J. K. Freericks, T. P. Devereaux // Book of Abstracts of the International Conference on Strongly Correlated Electron Systems (SCES'04). — Karlsruhe (Germany): 2004. — July 26–30. — P. 233.
40. Dynamical cluster studies of nonresonant Raman scattering in the Falicov-Kimball model / A. M. Shvaika, O. Vorobyov, J. K. Freericks et al. // Book of Abstracts of the Annual Conference in Ukraine "Statistical Physics 2005: Modern Problems and New Applications". — Lviv (Ukraine): 2005. — August 28–30. — P. 78.
41. Electronic Raman scattering in the Falicov-Kimball model / A. M. Shvaika, O. Vorobyov, J. K. Freericks et al. // Program and Abstracts of the Workshop on Correlated Thermoelectric Materials and Conference on Concepts in Electron Correlation. — Hvar (Croatia): 2005. — September 25–October 5.

42. *Shvaika, A.* Core-hole propagator and resonant inelastic X-ray scattering: exact results within a Baym-Kadanoff-Keldysh approach / A. Shvaika, T. Mysakovych, J. Freericks // Bulletin of the American Physical Society: 2008 APS March Meeting. — New Orleans, Louisiana (USA), 2008. — March 10–14. — Vol. 53, no. 2. — P36.8.

АНОТАЦІЯ

Швайка А.М. Багаточастинкова динаміка та ефекти непружного розсіяння у сильноскорельованих електронних системах. — Рукопис.
Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.02 — теоретична фізика, Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України, Львів, 2011.

Дисертація присвячена розвитку мікроскопічної теорії багаточастинкової динаміки сильноскорельованих електронних систем у підході сильного зв'язку і теорії динамічного середнього поля та дослідженню багаточастинкових сприйнятливостей і перерізів резонансного комбінаційного розсіяння. В рамках підходу сильного зв'язку побудовано самоузгоджений опис динаміки та термодинаміки моделей типу бінарного сплаву та проведено порівняння результатів узагальненого наближення хаотичних фаз та теорії динамічного середнього поля. Для моделей типу Хаббарда отримано, що одновузлова задача теорії динамічного середнього поля розпадається на підпростори, які відповідають фермі-рідині з феромагнітним основним станом і не-фермі-рідині з антиферомагнітним основним станом. Побудовано теорію динамічного середнього поля для систем з корельованим переносом. Розроблено схему сильного зв'язку для отримання незвідних вершин і динамічних сприйнятливостей у теорії динамічного середнього поля. Розраховано спектри рентгенівської фотоемісії сильноскорельованих електронних систем. Отримано спектральні співвідношення для багаточасових кореляційних функцій з врахуванням неергодичних внесків та побудовано формалізм аналітичного продовження для отримання резонансних внесків у переріз непружного розсіяння світла та рентгенівських променів. Досліджено вплив резонансних ефектів на перебудову спектрів розсіяння.

Ключові слова: електронна кореляція, теорія динамічного середнього поля, підхід сильного зв'язку, корельований перенос, модель Хаббарда, модель Фалікова-Кімбала, багаточастинкові динамічні сприйнятливості, спектральні співвідношення, комбінаційне розсіяння, непружне розсіяння рентгенівських променів.

АННОТАЦИЯ

Швайка А.М. Многочастичная динамика и эффекты неупругого рассеяния в сильнокоррелированных электронных системах. — Рукопись.

Диссертация на соискание научной степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.02 — теоретическая физика, Институт физики конденсированных систем Национальной академии наук Украины, Львов, 2011.

Диссертация посвящена развитию микроскопической теории многочастичной динамики сильнокоррелированных электронных систем в подходе сильной связи и теории динамического среднего поля и исследованию многочастичных восприимчивостей и сечений резонансного комбинационного рассеяния. В рамках подхода сильной связи построено самосогласованное описание динамики и термодинамики моделей типа бинарного сплава и проведено сравнение результатов обобщенного приближения хаотических фаз и теории динамического среднего поля. Для моделей типа Хаббарда установлено, что одноузловая задача теории динамического среднего поля распадается на подпространства, которые соответствуют ферми-жидкости с ферромагнитным основным состоянием и не-ферми-жидкости с антиферромагнитным основным состоянием. Построено теорию динамического среднего поля для систем с коррелированным переносом. Разработана схема сильной связи для получения неприводимых вершин и динамических восприимчивостей в теории динамического среднего поля. Рассчитаны спектры рентгеновской фотоэмиссии сильнокоррелированных электронных систем. Получены спектральные соотношения для многовременных корреляционных функций с учетом неэргодических вкладов и построен формализм аналитического продолжения для получения резонансных вкладов в сечение неупругого рассеяния света и рентгеновских лучей. Исследовано влияние резонансных эффектов на перестройку спектров рассеяния.

Ключевые слова: электронная корреляция, теория динамического среднего поля, подход сильной связи, коррелированный перенос, модель Хаббарда, модель Фаликова-Кимбала, многочастичные динамические восприимчивости, спектральные соотношения, комбинационное рассеяние, неупругое рассеяние рентгеновских лучей.

ABSTRACT

Shvaika A.M. Many-body dynamics and effects of inelastic scattering in strongly correlated electron systems. — Manuscript.
Thesis submitted for the degree of Doctor of Sciences in physics and mathematics on specialization 01.04.02 — theoretical physics, Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine, Lviv, 2011.

The thesis are devoted to the development of microscopic theory of many-body dynamics in strongly correlated electron systems within the strong coupling approach and dynamical mean field theory and to the elaboration of the methods of derivation and calculation of the many-body susceptibilities and cross-sections of inelastic (Raman) scattering.

Within the strong coupling approach the self-consistent description of the dynamics and thermodynamics of the binary alloy type (simplified pseudospin-electron and Falicov-Kimball) models is obtained. A comparison of the generalized random phase approximation and dynamical mean field theory is performed, which shows applicability of the generalized random phase approximation for large coupling.

A perturbation theory scheme in terms of electron hopping is developed. Diagrammatic series contain single-site vertices connected by hopping lines and it is shown that for each vertex the problem splits into the subspaces with different "vacuum states" and only excitations around these vacuum states are allowed. In the limit of infinite dimensions the auxiliary impurity problem exactly splits into subspaces and for the Hubbard model two of them correspond to the Fermi liquid with ferromagnetic ground state and another two correspond to the non-Fermi liquid with antiferromagnetic ground state.

It is shown that the description of correlated hopping in the dynamical mean field theory is possible only in the matrix generalization of the strong coupling approach. A grand-canonical potential functional is derived and a Φ-derivable theory is proposed. An exact solutions for the Falicov-Kimball model with correlated hopping are obtained and the Mott transition with the change of temperature is found.

A general scheme of strong coupling approach for the calculation of dynamical susceptibilities is developed and an algorithm of getting of the irreducible vertices and many-body susceptibilities in the dynamical mean field theory is elaborated. An exact analytical expressions for the irreducible charge vertex and dynamical susceptibilities (both isothermal and Kubo responses) are obtained for the Falicov-Kimball model.

The general approach to the derivation of the spectral relations for the multitime correlation and Green's functions including non-ergodic contributions is developed. Representation of the multitime Green's functions by the spectral densities is derived and solution of the reverse problem of finding the spectral densities from

the known Green's functions is given. Based on this the Jonson-Mahan theorem for the charge and thermal transport coefficients is extended on the case of multilayered nanostructures.

The general analytic continuation formulas which connect a multitime temperature correlation functions on imaginary axis and the nonresonant, mixed, and resonant Raman response functions are derived. An exact solutions for the Raman scattering near a metal-insulator transition are obtained for the Falicov-Kimball model using dynamical mean field theory. Resonant effects can yield a double resonance enhancement of nonresonant peaks, a joint resonance of peaks when the incident photon energy is on the order of interband transitions, and the appearance of an isosbestic point in all symmetry channels.

An alternative representations for the f-electron propagator of the Falicov-Kimball model and for the core-hole propagator which determines x-ray photoemission spectrum are derived in terms of a continuous fermionic Toeplitz determinants defined only on the upper real-time branch of the Keldysh contour which produces an efficient algorithm to obtain the density of states of the x-ray edge problem for any temperature and any interaction strength. An exact analytic formulas for the large time limits of Green's functions are obtained employing Wiener-Hopf sum equation approach and Szegö's theorem. X-ray photoemission spectrum contains two groups of peaks one of which correspond to the absorption edge. The resonant inelastic x-ray scattering (RIXS) response functions in correlated materials are analyzed for different values of the transferred momentum and incident photon energies (below and above the edge).

Keywords: electron correlation, dynamical mean field theory, strong coupling approach, correlated hopping, Hubbard model, Falicov-Kimball model, many-body dynamical susceptibilities, spectral relations, Raman scattering, inelastic x-ray scattering.