

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

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

Андрій Михайлович Швайка
Тарас Степанович Мисакович
Джеймс Фрірікс

СПЕКТРИ ФОТОЕМІСІЇ ТА РЕЗОНАНСНЕ НЕПРУЖНЕ РОЗСІЯННЯ
РЕНТГЕНОВИХ ПРОМЕНІВ

Роботу отримано 11 жовтня 2010 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку відділом квантової статистики

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені

Національна академія наук України



ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP-10-10U

А.М. Швайка, Т.С. Мисакович, Дж. Фрірікс*

Спектри фотоемісії та резонансне непружне розсіяння
Рентгенових променів

*Університет Джорджтауну, м. Вашингтон, округ Колумбія, США

ЛЬВІВ

УДК: 544.225.2, 535.376, 538.958

PACS: 71.10.Fd, 78.70.En, 78.70.Ck

Спектри фотоемісії та резонансне непружне розсіяння Рентгенових променів

А.М. Швайка, Т.С. Мисакович, Дж. Фрірікс

Анотація. Використовуючи теорію динамічного середнього поля отримані пропагатори дірок йонного залишку та функції відгуку резонансного непружного розсіяння Рентгенових променів. Розглядається безспінова модель Фалікова-Кімбала, для якої існує точний розв'язок, і яка зазнає переходу метал-діелектрик Мотта-Хаббарда. Пропагатор дірки йонного залишку виражається через функційні детермінанти Тепліца, які визначені тільки на верхній дійсній гілці контуру Келдиша, що суттєво пришвидшує розрахунок густини станів крайового рентгенівського спектру для довільної температури та величини взаємодії. Отримано двочастинкові вершини діаграмного зображення процесів прямого та непрямого розсіяння. Приведені результати для прямого резонансного непружного розсіяння Рентгенових променів.

Photoemission and resonant inelastic x-ray scattering

A.M. Shvaika, T.S. Mysakovich, J. Freericks

Abstract. We solve for the core-hole propagator and the resonant inelastic X-ray scattering (RIXS) response functions in correlated materials by employing dynamical mean-field theory. We focus our attention on the spinless Falicov-Kimball model, where the problem can be solved exactly, and the system can be tuned to go through a Mott-Hubbard-like metal-insulator transition. The core-hole propagator is expressed in terms of a continuous fermionic Toeplitz determinant 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. We have also derived the two-particle vertices in a diagrammatic representation of the direct and indirect scattering processes. As an example of this formalism, we show results for the direct RIXS.

1. Вступ

В останні роки відбувся значний прогрес у створенні інструментальної бази для проведення експериментів з непружного розсіяння Рентгенових променів. При резонансному розсіянні Рентгенових променів для збільшення перерізу розсіяння використовують збудження з глибокого електронного рівня йонного залишку у валентну оболонку. Можливості цього методу, як прямого засобу вимірювання енергії і імпульсу зарядових збуджень у складних матеріалах, було визнано ще в новаторських експериментах на початку сімдесятих років [1–3], але тільки з кінця вісімдесятих і на початку дев'яностих років, коли почали використовувати синхротрони як джерела Рентгенового випромінювання високої яскравості, резонансне розсіяння Рентгенових променів стає важливим інструментом досліджень [4]. Як при резонансному пружному розсіянні так і при резонансному непружному розсіянні Рентгенових променів, енергія надхідних фотонів підлаштовується до енергії порогу поглинання, напр., K ($1s \rightarrow 3d/4p$), $L_{2,3}$ ($2p \rightarrow 3d$) та $M_{2,3}$ ($3p \rightarrow 3d$) спектри сполук з перехідними металами, або $L_{2,3}$ ($2p \rightarrow 4f/5d$) та $M_{4,5}$ ($3d \rightarrow 4f$) спектри для рідкісноземельних сполук. При пружному розсіянні фотони не втрачають енергію, що відповідає когерентним процесам розсіяння. При цьому спостерігається поява Бреґових піків для векторів оберненої ґратки, що дозволяє досліджувати періодичні структури. Більш цікавим є поява “заборонених” Бреґових рефлексів, які зумовлені впорядкуванням у електронній підсистемі. Оскільки при резонансі відбувається збудження електрона у валентну оболонку, то резонансне розсіяння Рентгенових променів стає чутливим до магнітного впорядкування. Це було вперше показано для гольмію Гібсом та ін. [5] та пояснено Ганноном та ін. [6]. Тепер цей метод інтенсивно використовується для дослідження магнітних структур. Недавно резонансне розсіяння Рентгенових променів почали використовувати для дослідження зарядових та орбітальних впорядкувань [7–9].

З другого боку, рентгенівські фотони можуть також втрачати енергію при розсіянні. Такі процеси вже не є когерентні, а переріз розсіяння набагато слабший ніж при резонансному пружному розсіянні. Після акту розсіяння у системі залишається додаткове збудження з енергією та імпульсом, які були втрачені розсіяним фотоном. Резонансне непружне розсіяння Рентгенових променів використовується для дослідження широкого класу матеріалів, зокрема, сильноскорельованих електронних систем, надпровідників та органічних сполук [10]. У фізиці конденсованих систем цей метод до-

зволив розібратися у багатьох процесах, напр., дисперсії імпульсу зарядових збуджень у високотемпературних надпровідниках та сподієних системах [11–14], dd збудженнях у сполуках з перехідними металами [10, 15–17], орбітальних збудженнях [18, 19], особливостях густини станів у напівпровідниках [20, 21] та уточненні масштабів Кондо для систем з важкими ферміонами [22].

Мікроскопічний механізм резонансного непружного розсіяння Рентгенових променів можна проілюструвати наступним прикладом. У випадку мідно-кисневих сполук завжди можна настроїти енергію надхідних фотонів у резонанс з K , L або M краєм поглинання міді, причому кожен раз збуджується електрон з різних рівнів йонного залишку у незаповнену валентну зону, див. рис. 1 та 2. Йон Cu^{2+} має електронну конфігурацію $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^9$ з частково заповненою валентною $3d$ оболонкою, що типowo для перехідних металів. Енергія переходу K краю поглинання міді $1s \rightarrow 4p$ є порядку 9000 eV, що відповідає жорсткому Рентгеновому випромінюванню. Енергії переходів $L_{2,3}$ краю поглинання $2p \rightarrow 3d$ (~ 900 eV) та $M_{2,3}$ краю поглинання $3p \rightarrow 3d$ (~ 80 eV) відповідають м'якому Рентгеновому випромінюванню. Додатково ще можна настроїтися на K край поглинання кисню, який відповідає переходу між станами кисню $1s \rightarrow 2p$ і становить порядку ~ 500 eV.

Після поглинання м'яких або жорстких рентгенівських фотонів система переходить у високоенергетичний нестійкий стан внаслідок утворення дірки глибоко у йонному залишку. Система швидко релаксує з цього проміжного стану за час порядку $1 \div 2$ фемтосекунди. Релаксація може відбуватися різним чином, зокрема через процеси Оже, коли електрон заповнює стан йонного залишку з одночасним випромінюванням іншого електрона. Такий нерадіаційний канал розпаду не пов'язаний з непружним розсіянням, яке, на противагу, регулюється радіаційним (флуоресцентним) розпадом, коли пустий стан йонного залишку заповнюється електроном з одночасним випромінюванням фотона.

Процеси резонансного непружного розсіяння Рентгенових променів поділяють на *прямі* та *непрямі* [23, 24], які розрізняються механізмами передачі імпульсу та енергії між фотонами і речовиною та мають суттєво різну величину перерізу розсіяння. Якщо присутнє пряме розсіяння, то воно є основним каналом розсіяння. З другого боку, для багатьох експериментальних ситуацій пряме розсіяння заборонене і тоді непружне розсіяння визначається винятково непрямими каналами розсіяння.

При прямому розсіянні, надхідний фотон вибиває електрон з йон-

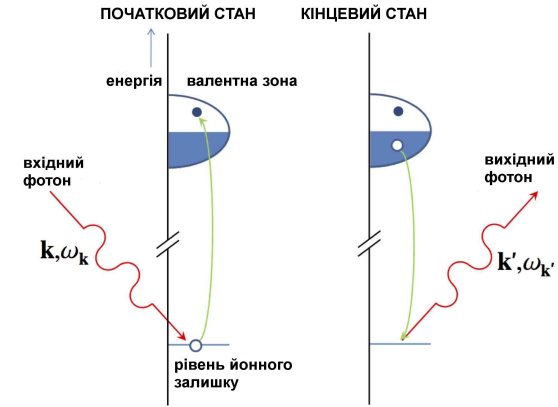


Рис. 1. При прямому непружному розсіянні фотон вибиває електрон з рівня йонного залишку у валентні зони. Пустий стан йонного залишку потім заповнюється електроном з заповнених станів з одночасним випромінюванням фотона. Такий процес утворює збудження валентного стану з імпульсом $\hbar k' - \hbar k$ та енергією $\hbar \omega_k - \hbar \omega_{k'}$.

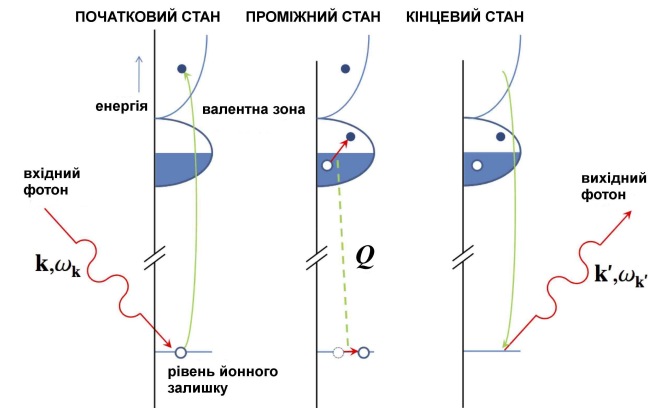


Рис. 2. При непрямому розсіянні фотон вибиває електрон з рівня йонного залишку у валентну зону. Збудження утворюються внаслідок Кулової взаємодії Q між зарядженою діркою у йонному залишку, а у деяких випадках і збудженим електроном, та валентними електронами.

ного залишку у пусті стани валентної зони, див. рис. 1. Згодом електрон з *нижого* стану валентної зони анігілює з діркою, яка утворюється у йонному залишку. В кінці залишається стан з електрон-дірковим збудженням: електрон у пустих станах валентної зони і дірка у заповнених станах, див. рис. 1. Умовою прямого непружного розсіяння у першу чергу є дозволеність прямих дипольних переходів між станами йонного залишку та валентної зони, напр., переходи $1s \leftrightarrow 2p$ для K краю поглинання кисню, вуглецю чи кремнію, або переходи $2p \rightarrow 3d$ для L краю поглинання перехідних металів. В усіх цих випадках пряме розсіяння безпосередньо зондує стани валентної зони та зони провідності.

Непряме непружне розсіяння є трохи складнішим. У цьому випадку відсутні, або дуже слабкі, прямі переходи між рівнем йонного залишку і зоною провідності. Замість цього, фотон збуджує електрон йонного залишку у пусті стани, які знаходяться на декілька електрон-вольт вище рівня Фермі. Згодом цей же електрон анігілює з діркою йонного залишку, див. рис. 2. Такі процеси відбуваються, напр., поблизу K краю поглинання перехідних металів ($1s \rightarrow 4p$). Якщо немає ніяких додаткових взаємодій, то фотон випромінеться з тією ж енергією. Але у проміжному стані існує заряджена дірка йонного залишку, яка взаємодіє з великим кулонівським потенціалом Q з валентними $3d$ електронами, які будуть намагатися її екранувати. Потенціал цієї дірки буде розсіювати валентні електрони утворюючи електрон-діркові збудження у валентній зоні. Після зворотнього переходу $4p \rightarrow 1s$ ці збудження залишаються і поширюються у системі. Тому непряме непружне розсіяння зумовлене струсом електронної підсистеми внаслідок появи проміжного стану дірки йонного залишку.

В загальному, переріз непружного розсіяння Рентгенових променів містить внески від різних багаточастинкових процесів. Основний внесок іде від локальних збуджень і він є однаковий для різних значень імпульсу фотонів. Додатково присутні також внески від пропагаторних (нелокальних) збуджень, які володіють значною дисперсією. У даній роботі проведено дослідження таких залежних від імпульсу внесків у спектри непружного розсіяння на прикладі простої моделі типу моделі Фалікова-Кімбала [25], яка володіє точним розв'язком у теорії динамічного середнього поля [26]. Спочатку, використовуючи зображення через функційні визначники [27], розраховано пропагатори дірок йонного залишку, які у свою чергу визначають рентгеновські спектри фотоемісії [28]. Потім проаналізовані залежні від імпульсу внески у переріз непружного розсіяння

Рентгенових променів від процесів прямого та непрямого розсіяння. У кінці приведені дані числових розрахунків спектрів фотоемісії та перерізів непружного розсіяння та зроблено аналіз отриманих результатів.

2. Функції Гріна для дірки йонного залишку

Головна особливість станів йонного залишку полягає у їхній ізольованості і відсутності перекривання зі станами інших йонів. Тому властивості дірки йонного залишку дуже подібні до властивостей локалізованих f -електронів у моделі Фалікова-Кімбала: вони не поширюються по ґратці і локально взаємодіють з іншими електронами.

Розглянемо для прикладу просту систему, коли валентні стани електронної підсистеми сильскорельованої сполуки описуються моделлю Фалікова-Кімбала. Для врахування взаємодії зонних електронів зі збудженнями у йонному кістяку, одноузловий гамільтоніан моделі слід доповнити взаємодією з діркою йонного залишку

$$H_{\text{loc}} = U n_d n_f + Q_d n_d n_h + Q_f n_f n_h + E_f n_f + E_h n_h - \mu (n_d + n_f + n_h) \\ = H_0 (1 - n_h) + H_1 n_h, \quad (2.1)$$

$$H_0 = E_f n_f + U n_d n_f - \mu (n_d + n_f), \quad (2.2)$$

$$H_1 = (E_f + Q_f - \mu) n_f + U n_d n_f + (Q_d - \mu) n_d + E_h - \mu, \quad (2.3)$$

де $n_d = d^\dagger d$, $n_f = f^\dagger f$ та $n_h = h^\dagger h$ — оператори числа частинок (дірок) у d та f станах та на рівні йонного залишку, відповідно, $U > 0$ — одноузлова Кулонова взаємодія між d та f дірками, $Q_d > 0$ та $Q_f > 0$ — константи Кулонової взаємодії між діркою йонного залишку та дірками у d та f станах, відповідно, E_f — енергія f стану і $E_h \sim 10^2 - 10^4$ eV — енергія збудженого стану йонного залишку. Для опису процесів непрямого розсіяння до гамільтоніана слід додати ще доданки, які відповідають p -станам

$$H_p = \sum_{\mathbf{k}} [E_p + \varepsilon_p(\mathbf{k}) - \mu] p_{\mathbf{k}}^\dagger p_{\mathbf{k}}. \quad (2.4)$$

Статистичний оператор для ефективної одноузлової задачі довірне

$$\rho = \frac{1}{\mathcal{Z}} e^{-\beta H_{\text{loc}}} \mathcal{T}_c \exp \left\{ -i \int_c dt' \int_c dt'' d^\dagger(t') \lambda_c(t', t'') d(t'') \right\}, \quad (2.5)$$

де часове впорядкування та інтегрування виконуються вздовж контура Каданова-Бейма-Келдиша [29, 30] і $\beta = 1/T$ — обернена темпе-

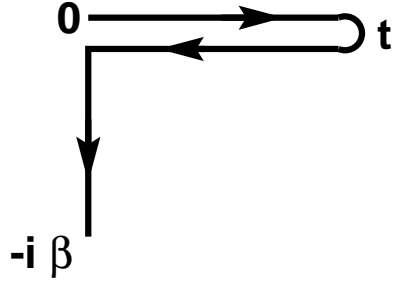


Рис. 3. Контур Каданова-Бейма-Келдиша. Контур стартує у момент часу 0, рухається вздовж дійсної вісі до моменту часу t , потім назад до моменту часу 0, і нарешті поширюється вниз по уявній вісі до моменту часу $-i\beta$.

ратура; контур Каданова-Бейма-Келдиша зображений на рис. 3: він стартує у момент часу 0, рухається вздовж дійсної вісі до максимального моменту часу $t_{\max} \rightarrow \infty$, потім назад до моменту часу 0, і нарешті поширюється вниз по уявній вісі до моменту часу $-i\beta$. Тут динамічне середнє поле $\lambda_c(t', t'')$ та значення хімічного потенціалу μ беруться з рівноважного розв'язку задачі для колективізованих електронів у теорії динамічного середнього поля [26]. Тобто, динамічне середнє поле дорівнює

$$\lambda_c(t, t') = -\frac{i}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \operatorname{Im} \lambda(\omega) e^{-i\omega(t-t')} [f(\omega) - \Theta_c(t, t')], \quad (2.6)$$

де $\lambda(\omega)$ — звичайне запізнене динамічне середнє поле на дійсній вісі, яке отримується з розв'язку теорії динамічного середнього поля для моделі, $f(\omega) = 1/[1 + \exp(\beta\omega)]$ — розподіл Фермі-Дірака, а $\Theta_c(t, t')$ — східцева функція Хевісайда на контурі, яка дорівнює 1 коли t попереду t' на контурі, дорівнює 0 коли t позаду t' на контурі і дорівнює $1/2$ коли t збігається з t' на контурі. Дане означення λ_c -поля відрізняється на множник “ i ” від означення роботи [26] і відповідає загальноприйнятим правилам.

Статистична сума для такої одновузлової задачі містить чотири доданки $\mathcal{Z}_\alpha = \mathcal{Z}_{n_h n_f}$:

$$\mathcal{Z} = \mathcal{Z}_{00} + \mathcal{Z}_{01} + e^{\beta(\mu - E_h)} [\mathcal{Z}_{10} + \mathcal{Z}_{11}], \quad (2.7)$$

які відповідають різним заповненням локальних станів f -частинок

та дірок йонного залишку:

$$\mathcal{Z}_{00} = [1 + e^{\beta\mu}] \prod_m \left(1 - \frac{\lambda_m}{i\omega_m + \mu} \right), \quad (2.8)$$

$$\mathcal{Z}_{01} = e^{\beta(\mu - E_f)} [1 + e^{\beta(\mu - U)}] \prod_m \left(1 - \frac{\lambda_m}{i\omega_m + \mu - U} \right), \quad (2.9)$$

$$\mathcal{Z}_{10} = [1 + e^{\beta(\mu - Q_d)}] \prod_m \left(1 - \frac{\lambda_m}{i\omega_m + \mu - Q_d} \right), \quad (2.10)$$

$$\mathcal{Z}_{11} = e^{\beta(\mu - E_f - Q_f)} [1 + e^{\beta(\mu - U - Q_d)}] \times \prod_m \left(1 - \frac{\lambda_m}{i\omega_m + \mu - U - Q_d} \right).$$

Тут окремо виділено множник з енергією дірки йонного залишку E_h і для великих значень $E_h > 0$ можна покласти $e^{\beta(\mu - E_h)} \rightarrow 0$.

Нашою метою є розрахунок запізненої функції Гріна для дірки йонного залишку, яку можна отримати аналогічно, як це робилося для пропагаторів f -частинок [27]. Розглядаються функції Гріна: “більша” для додатніх часів $t > 0$

$$G_h^>(t) = -i \langle h(t) h^\dagger(0) \rangle = -\frac{i}{\mathcal{Z}} \operatorname{Sp} e^{-\beta H_{\text{loc}}} \times \mathcal{T}_c \exp \left\{ -i \int_c dt' \int_c dt'' d^\dagger(t') \lambda(t', t'') d(t'') \right\} h(t) h^\dagger(0) \quad (2.12)$$

та “менша” для від'ємних часів $t < 0$ (або $\bar{t} = -t > 0$)

$$G_h^<(t) = i \langle h^\dagger(\bar{t}) h(0) \rangle = \frac{i}{\mathcal{Z}} \operatorname{Sp} e^{-\beta H_{\text{loc}}} \times \mathcal{T}_c \exp \left\{ -i \int_c dt' \int_c dt'' d^\dagger(t') \lambda(t', t'') d(t'') \right\} h^\dagger(\bar{t}) h(0). \quad (2.13)$$

Так само, як це робилося при розгляді задачі про спектр локалізованих f -електронів для моделі Фалікова-Кімбала [27], записуємо рівняння руху для операторів дірки йонного залишку

$$\frac{dh(t)}{dt} = -i [Q_d n_d(t) + Q_f n_f(t) + E_h - \mu] h(t), \quad (2.14)$$

$$\frac{dh^\dagger(\bar{t})}{d\bar{t}} = i [Q_d n_d(\bar{t}) + Q_f n_f(\bar{t}) + E_h - \mu] h^\dagger(\bar{t}), \quad (2.15)$$

та підставляємо їхній розв'язок у рівняння (2.12) та (2.13).

Виконуючи аналогічні перетворення, як це робилося для f -пропатора [27], отримуємо остаточні вирази через функційні визначники для “більшої” функції Гріна ($t > 0$)

$$G_h^>(t) = -i \frac{Z_{00}}{Z} e^{-i(E_h - \mu)t} \det_{[0,t]} \|\delta(t_1 - t_2) - Q_d G_{00}(t_1 - t_2)\| \quad (2.16)$$

$$- i \frac{Z_{01}}{Z} e^{-i(Q_f + E_h - \mu)t} \det_{[0,t]} \|\delta(t_1 - t_2) - Q_d G_{01}(t_1 - t_2)\|$$

та для “меншої” функції Гріна ($\bar{t} = -t > 0$)

$$G_h^<(t) = i e^{\beta(\mu - E_h)} \frac{Z_{10}}{Z} e^{i(E_h - \mu)\bar{t}} \det_{[0,\bar{t}]} \|\delta(t_1 - t_2) + Q_d G_{10}(t_1 - t_2)\| \quad (2.17)$$

$$+ i e^{\beta(\mu - E_h)} \frac{Z_{11}}{Z} e^{i(Q_f + E_h - \mu)\bar{t}} \det_{[0,\bar{t}]} \|\delta(t_1 - t_2) + Q_d G_{11}(t_1 - t_2)\|.$$

Тут

$$G_\alpha(t' - t'') = -\frac{i}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \operatorname{Im} \mathcal{G}_\alpha(\omega) e^{-i\omega(t' - t'')} [f(\omega) - \Theta(t' - t'')]. \quad (2.18)$$

— часововпорядкована функція Гріна, яка виражається через відповідну запізнену функцію Гріна для ефективного середовища

$$\mathcal{G}_\alpha(\omega) = \frac{1}{\omega + i\delta - \epsilon_\alpha - \lambda(\omega + i\delta)}, \quad (2.19)$$

де $\epsilon_\alpha = \epsilon_{n_h n_f}$ — одновузлові енергії, які відповідають різному заповненню станів йонного залишку та f рівня: $\epsilon_{00} = -\mu$, $\epsilon_{01} = U - \mu$, $\epsilon_{10} = Q_d - \mu$ та $\epsilon_{11} = Q_d + U - \mu$.

Запізнена функція Гріна визначається через “більшу” та “меншу” функції Гріна у вигляді

$$G_h^r(t) = \Theta(t) \{G_h^>(t) - G_h^<(t)\}, \quad (2.20)$$

що дає наступний вираз

$$G_h^r(t) = -i\Theta(t) \left\{ \frac{Z_{00}}{Z} e^{-i(E_h - \mu)t} \det_{[0,t]} \|I - Q_d G_{00}\| \quad (2.21)$$

$$+ \frac{Z_{01}}{Z} e^{-i(Q_f + E_h - \mu)t} \det_{[0,t]} \|I - Q_d G_{01}\|$$

$$+ e^{\beta(\mu - E_h)} \left[\frac{Z_{10}}{Z} e^{-i(E_h - \mu)t} (\det_{[0,t]} \|I + Q_d G_{10}\|)^*$$

$$+ \frac{Z_{11}}{Z} e^{-i(Q_f + E_h - \mu)t} (\det_{[0,t]} \|I + Q_d G_{11}\|)^* \right] \right\}.$$

Для великих значень енергії дірки йонного залишку E_h можна покласти $e^{\beta(\mu - E_h)} \rightarrow 0$ і тоді запізнена функція Гріна визначається тільки “більшою” функцією

$$G_h^r(t) = \Theta(t) G_h^>(t) \quad (2.22)$$

$$= -i\Theta(t) \left[w_0 e^{-i(E_h - \mu)t} \det_{[0,t]} \|I - Q_d G_{00}\| \right.$$

$$\left. + w_1 e^{-i(Q_f + E_h - \mu)t} \det_{[0,t]} \|I - Q_d G_{01}\| \right],$$

де

$$w_0 = \frac{Z_{00}}{Z_{00} + Z_{01}}, \quad w_1 = \frac{Z_{01}}{Z_{00} + Z_{01}} \quad (2.23)$$

— заселеності f станів при відсутності дірки у йонному залишку. Її Фур’є-образ дорівнює

$$G_h^r(\omega) = -i \int_0^{+\infty} dt \left\{ w_0 e^{i(\omega + \mu - E_h)t} \det_{[0,t]} \|I - Q_d G_{00}\| \quad (2.24)$$

$$+ w_1 e^{i(\omega + \mu - Q_f - E_h)t} \det_{[0,t]} \|I - Q_d G_{01}\| \right\}.$$

і дає як дійсну так і уявну частини запізненої функції Гріна для дірки йонного залишку, причому уявна частина пропатора дірки йонного залишку безпосередньо визначає рентгенівський фотоemisійний спектр [28].

3. Пряме та непряме непружне розсіяння Рентгенових променів на сильноскорельованих електронах

Процеси взаємодії рентгенівських фотонів з електронною підсистемою речовини можна зобразити з допомогою діаграм, які приведені на рис. 4. Тут хвилясті лінії зображають фотони, штрихові лінії — пропатори дірок йонного залишку, а суцільні лінії — пропатори для колективізованих електронів: пропатори d дірок для прямого розсіяння та пропатори p і/або d дірок для непрямого розсіяння. Для візуального контролю енергетичних масштабів всюди вказано пряму залежність пропатора дірки йонного залишку від енергії відповідного стану E_h , яка вважається набагато більшою від енергії зонних станів та складає порядку величини енергії надхідних і розсіяних рентгенівських фотонів ω_i і ω_f , відповідно. Можна побачити,

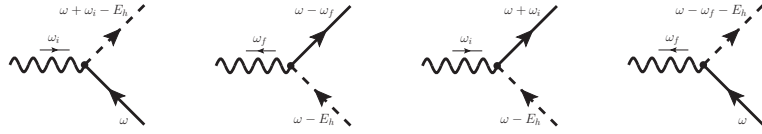


Рис. 4. Зовнішні вершини, які відповідають поглинанню та випромінненню рентгенівських фотонів.

що для великих значень енергій фотонів і стану дірки внесок дають тільки перші дві діаграми, які містять різницю $\omega_{i,f} - E_h$. Як наслідок, однопетлеві внески містять тільки дві діаграми, які зображені на рис. 5. Оскільки пропагатор дірки йонного залишку локальний,

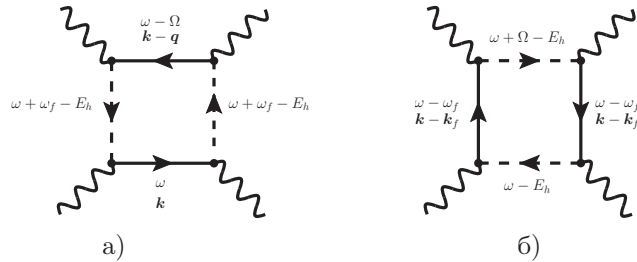


Рис. 5. Однопетлеві внески у переріз резонансного непружного розсіяння Рентгенових променів.

то друга діаграма (б) не залежить від імпульсу фотона і дає внесок у фоновий відгук, який не залежить від хвильового вектора. З другого боку, перша діаграма (а) залежить від переданого імпульсу $\mathbf{q} = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f$. Внески від цих діаграм у чотиричасову кореляційну функцію $\chi_{i,f,f,i}^{(4)}(i\nu_i, i\nu_f, i\nu'_f, i\nu'_i)$ дорівнюють

$$-\frac{1}{\beta} \sum_m \chi_0^{dd}(i\omega_m - i\nu_i + i\nu_f, i\omega_m | \mathbf{q}) \chi_0^{hh}(i\omega_m + i\nu_f, i\omega_m + i\nu'_f) \quad (3.1)$$

та

$$-\frac{1}{\beta} \sum_m \chi_0^{hh}(i\omega_m + i\nu_i - i\nu_f, i\omega_m) \chi_0^{dd}(i\omega_m - i\nu_f, i\omega_m - i\nu'_f | 0), \quad (3.2)$$

відповідно, де введено нульові двочастинкові сприйнятливості

$$\chi_0^{dd}(i\omega_m + i\nu, i\omega_m | \mathbf{q}) = -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} G_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^d(i\omega_m + i\nu) G_{\mathbf{k}}^d(i\omega_m), \quad (3.3)$$

$$\chi_0^{hh}(i\omega_m + i\nu, i\omega_m) = -G_h(i\omega_m + i\nu - E_h) G_h(i\omega_m - E_h),$$

а також вказано пряму залежність пропагаторів дірки йонного залишку від енергії E_h . Внесок у переріз непружного розсіяння від першої діаграми дорівнює

$$\frac{1}{2\pi^2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega [f(\omega) - f(\omega - \Omega)] \chi_0^{hh}(\omega + \omega_f - i\delta, \omega + \omega_f + i\delta) \quad (3.4)$$

$$\times \text{Re}[\chi_0^{dd}(\omega - \Omega - i\delta, \omega - i\delta | \mathbf{q}) - \chi_0^{dd}(\omega - \Omega + i\delta, \omega - i\delta | \mathbf{q})]$$

або

$$\frac{1}{2\pi^2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega [f(\omega + \Omega) - f(\omega)] \chi_0^{hh}(\omega + \omega_i - i\delta, \omega + \omega_i + i\delta) \quad (3.5)$$

$$\times \text{Re}[\chi_0^{dd}(\omega - i\delta, \omega + \Omega - i\delta | \mathbf{q}) - \chi_0^{dd}(\omega + i\delta, \omega + \Omega - i\delta | \mathbf{q})],$$

де

$$\chi_0^{hh}(\omega + \omega_i - i\delta, \omega + \omega_i + i\delta) = -|G_h(\omega + i\delta + \omega_i - E_h)|^2. \quad (3.6)$$

Внесок від другої діаграми має подібний вигляд

$$\frac{1}{2\pi^2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega [f(\omega) - f(\omega - \Omega)] \chi_0^{dd}(\omega + \omega_f - i\delta, \omega + \omega_f + i\delta | 0) \quad (3.7)$$

$$\times \text{Re}[\chi_0^{hh}(\omega - \Omega - i\delta, \omega - i\delta) - \chi_0^{hh}(\omega - \Omega + i\delta, \omega - i\delta)]$$

і не залежить від імпульсів фотонів. Більше того, цей внесок визначається незбуреною однорідною зарядовою сприйнятливістю, яка занулюється для випадку невзаємодіючих електронів. У випадку сильно-скорельованих d електронів такий доданок слід доповнити перенормованими внесками від зарядового екранування (вставки між пропагаторами d електронів, див. нижче), що дасть повну однорідну сприйнятливість, яка знову ж таки дорівнює нулю і такими внесками можна знехтувати.

Тепер розглянемо перенормування однопетлевих внесків. У найпростішому випадку це можна отримати вставляючи зарядові вершини або у вертикальні або у горизонтальні канали розсіяння. Спочатку розглянемо вплив зарядового екранування у горизонтальних каналах. Відповідні діаграми зображено на рис. 6. Сума внесків від

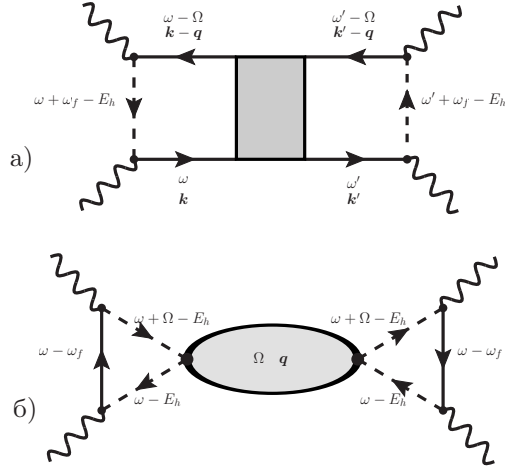


Рис. 6. Зарядові перенормування у горизонтальному каналі розсіяння. Заштрихований прямокутник відповідає повній (звідній) зарядовій вершині, а заштрихований овал — повній зарядовій сприйнятливості.

перших діаграм на рис. 5а та 5б відповідає заміні у виразі (3.5) незбуреної сприйнятливості $\chi_0^{dd}(i\omega_m + i\nu, i\omega_m | \mathbf{q})$ повною сприйнятливостю, яка для моделі Фалікова-Кімбала дорівнює [31–33]

$$\chi^{dd}(i\omega_{m+\nu}, i\omega_m | \mathbf{q}) = \left\{ [\chi_0^{dd}(i\omega_{m+\nu}, i\omega_m | \mathbf{q})]^{-1} + T\Gamma(i\omega_m + i\nu, i\omega_m) \right\}^{-1}, \quad (3.8)$$

що дає

$$\frac{-1}{2\pi^2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega [f(\omega + \Omega) - f(\omega)] |G_h(\omega + i\delta + \omega_i - E_h)|^2 \times \text{Re}[\chi^{dd}(\omega - i\delta, \omega + \Omega - i\delta | \mathbf{q}) - \chi^{dd}(\omega + i\delta, \omega + \Omega - i\delta | \mathbf{q})]. \quad (3.9)$$

Даний внесок відповідає процесам прямого непружного розсіяння Рентгенових променів.

Внесок від другої діаграми на рис. 6б у чотиричасову кореляційну функцію $\chi_{i,f,f,i}^{(4)}(i\nu_i, i\nu_f, i\nu'_f, i\nu'_i)$ дорівнює

$$Q_d^2 \Lambda(i\nu_i, i\nu_f, i\nu_i - i\nu_f) \Lambda(i\nu'_i, i\nu'_f, i\nu_i - i\nu_f) \chi_{\mathbf{q}}^{dd}(i\nu_i - i\nu_f), \quad (3.10)$$

де

$$\chi_{\mathbf{q}}^{dd}(i\nu) = \frac{1}{\beta} \sum_m \chi^{dd}(i\omega_m + i\nu, i\omega_m | \mathbf{q}) \quad (3.11)$$

— повна зарядова сприйнятливість і

$$\Lambda(i\nu_i, i\nu_f, i\nu_i - i\nu_f) = -\frac{1}{\beta} \sum_m G_{d,p}(i\omega_m - i\nu_f) \times G_h(i\omega_m + i\nu_i - i\nu_f - E_h) G_h(i\omega_m - E_h). \quad (3.12)$$

Тут використано наближення Хартрі-Фока для змішаної зарядової вершини дірка йонного залишку— d -частинка, тобто замінено на величину Кулонової взаємодії Q_d . Відповідний внесок у переріз непружного розсіяння Рентгенових променів дорівнює

$$\frac{Q_d^2}{\pi} \text{Im}[\Lambda(\omega_i + i\delta, \omega_f + i\delta, \Omega + i\delta) \Lambda(\omega_i - i\delta, \omega_f - i\delta, \Omega + i\delta) \chi_{\mathbf{q}}^{dd}(\Omega + i\delta)], \quad (3.13)$$

де

$$\Lambda(\omega_i + i\delta, \omega_f + i\delta, \Omega \pm i\delta) = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega f(\omega) \times [G_h(\omega + i\delta + \omega_i - E_h) G_h(\omega + i\delta + \omega_f - E_h) \text{Im} G_{d,p}(\omega) + G_{d,p}(\omega - \omega_i - i\delta) G_h(\omega \mp i\delta - \Omega - E_h) \text{Im} G_h(\omega - E_h) + G_{d,p}(\omega - \omega_f - i\delta) G_h(\omega \pm i\delta + \Omega - E_h) \text{Im} G_h(\omega - E_h)] \approx -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega f(\omega) \text{Im} G_{d,p}(\omega) \times G_h(\omega + i\delta + \omega_i - E_h) G_h(\omega + i\delta + \omega_f - E_h), \quad (3.14)$$

і збережено тільки перший внесок з малою різницею енергій $\mu + \omega_{i,f} - E_h$, тоді як іншими двома внесками можна знехтувати для великих значень енергії E_h оскільки вони містять великі різниці енергій у знаменниках $\mu - E_h$ та $\mu + \Omega - E_h$. Отримані вирази відповідають непрямим процесам резонансного непружного розсіяння, коли електронна

підсистема струшується потенціалом Q_d внаслідок утворення дірки у йонному залишку.

Аналогічні перенормування можна виконати і у вертикальних каналах розсіяння. Але як уже зазначалося вище, таке перенормування для d частинок приводить до скасування однопетлевого внеску. З другого боку, двочастинкове екранування дірки йонного залишку у вертикальному каналі пов'язане з однорідною зарядовою сприйнятливістю, яка дорівнює нулю, і також не дає внеску.

Можна також враховувати перенормування від петель з пропагаторів дірок йонного залишку

$$\begin{aligned} \chi_0^{hh}(i\nu) &= \frac{1}{\beta} \sum_m \chi_0^{hh}(i\omega_m + i\nu, i\omega_m) \\ &= -\frac{1}{\beta} \sum_m G_h(i\omega_m + i\nu - E_h) G_h(i\omega_m - E_h) \\ &= \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega f(\omega) \text{Im} G_h(\omega - E_h) [G_h(\omega + i\nu - E_h) + G_h(\omega - i\nu - E_h)], \end{aligned} \quad (3.15)$$

але такі внески також містять великі різниці енергій у знаменниках $\mu - E_h$ і $\mu + \Omega - E_h$ і ними нехтуємо.

Звичайно, що можливі також внески не тільки від двочастинкових перенормувань, але і від вершин вищого порядку. Але можна показати, що у границі $D \rightarrow \infty$ такі внески або занулюються, або стають локальними і не залежать від переданого імпульсу q .

4. Отримані результати та обговорення

Як уже зазначалося вище, уявні частини пропагаторів дірок йонного залишку визначають рентгенівські спектри фотоemisії. Самі пропагатори містять два доданки у вигляді функційних визначників (2.24) і, як було показано в роботі [27], їхню точну довгочасову асимптотику можна отримати використовуючи дискретний метод Вінера-Гопфа і теорему Сеґе для матриць Тепліца, причому довгочасова поведінка визначається індукцією відповідної характеристичної функції. Перший доданок ($\alpha = 00$) для випадку $Q_d = U$ збігається з “більшою” функцією Гріна для f частинок у моделі Фалікова-Кімбала [27] і індукція відповідної характеристичної функції може дорівнювати як 0 так і -1 . Як наслідок, відповідний внесок у густину станів може змінюватися, залежно від значення параметрів, від Лоренцового піку до двопікової структури Моттового діелектрика. З другого боку,

індукція характеристичної функції для другого доданку ($\alpha = 01$) завжди дорівнює нулю, а відповідний внесок у густину станів буде мати форму Лоренцового піку, незалежно чи система перебуває у металічному стані чи у стані Моттового діелектрика. Інтенсивність (вага) першого внеску визначається кількістю вузлів з незаповненим f станом, а інтенсивність другого — кількістю вузлів з заповненим f станом.

На рис. 7 приведені рентгенівські фотоemisійні спектри для силь-

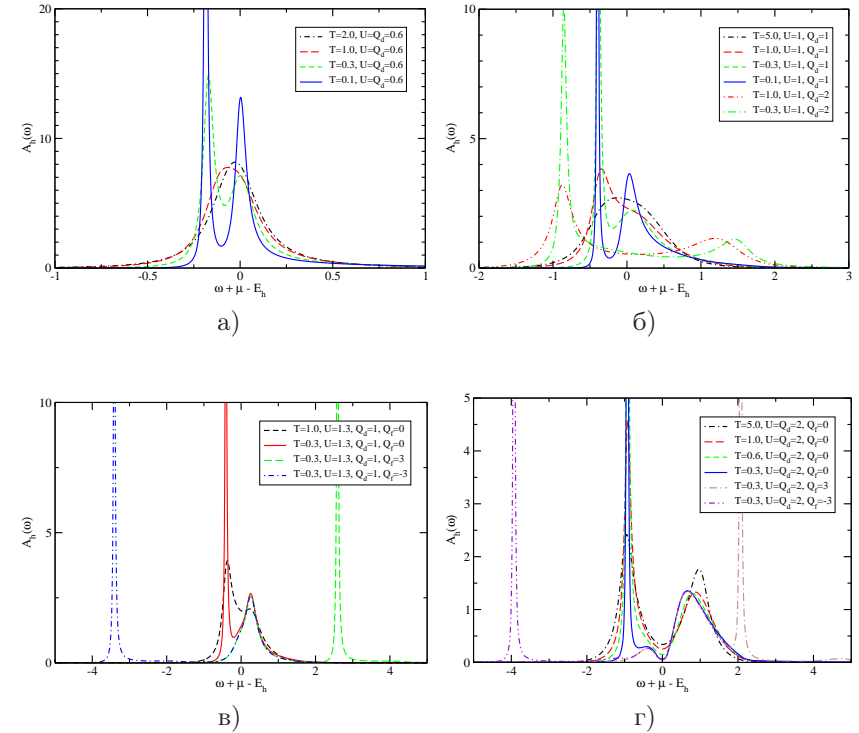


Рис. 7. Рентгенівські фотоemisійні спектри при половинному заповненні $n_d = n_f = 1/2$.

носкорельованої системи, яка описується моделлю Фалікова-Кімбала при половинному заповненні. При малих значеннях енергій взаємодій (рис. 7а), коли індукція характеристичних функцій для обох доданків дорівнює нулеві, спектр складається з двох Лоренцових піків, які загострюються з пониженням температури, причому інтенсивність лівого піку, який походить від другого внеску, наростає наба-

гато швидше ніж іншого. При зростанні величини Кулонової взаємодії між діркою йонного залишку та колективізованими носіями Q_d збільшується відстань між цими піками (рис. 7б). Додатково відстань між цими двома доданками визначається також енергією взаємодії між f -частинкою та діркою йонного залишку Q_f (рис. 7в і г). Для більших значень енергій Кулонової взаємодії Q_d та U , коли індукція характеристичної функції для першого внеску дорівнює -1 , відповідний внесок у повний спектр фотоemisії змінює форму з Лоренцової на більш складну, яка слабо змінюється при пониженні температури (рис. 7г).

Проведені розрахунки функцій відгуку для резонансного непружного розсіяння Рентгенових променів встановили, що внески від непрямих процесів розсіяння набагато менші за внески від прямих процесів розсіяння, що узгоджується з отриманими раніше результатами (див. напр., [4]). На рис. 8 та 9 приведені спектри резонансного прямого непружного розсіяння для різних енергій збудження ω_i та для різних значень енергії Кулонової взаємодії.

У границі нескінченної вимірності $D \rightarrow \infty$ незбурені сприйнятливості для колективізованих носіїв (3.3) залежать від переданого імпульсу \mathbf{q} тільки через величину $X(\mathbf{q}) = \frac{1}{D} \sum_{\alpha} \cos q_{\alpha}$, яка змінює своє значення від $+1$ у центрі зони Брилюена [$\mathbf{q} = 0$] до -1 у куті зони Брилюена [$\mathbf{q} = (\pi, \pi, \dots)$]. При $\mathbf{q} = 0$ вирази для функцій відгуку містять однорідні зарядові сприйнятливості, які дорівнюють нулю, а отже занулюється і сам відгук. Зі зростанням величини переданого імпульсу (зменшення значень X) відбувається поступове, але неоднорідне, наростання відгуку, який досягає максимального значення у куті зони Брилюена.

Отримана залежність величини перерізу непружного розсіяння Рентгенових променів від енергії збуджуючого фотона ω_i є зовсім очікуваною. При малих (передпорогових) значеннях енергії збудження $\omega_i < E_h - \mu$ електрон з рівня йонного залишку закидається у область заповнених валентних станів нижче рівня хімічного потенціалу де немає достатньої кількості вільних станів, а отже такий процес є малоймовірний, а відповідний відгук непружного розсіяння слабкий. При збільшенні енергії фотонів $\omega_i \geq E_h - \mu$ збуджений електрон попадає у область вільних станів, що приводить до суттєвого зростання відгуку до тих пір поки збуджений електрон не почне вилітати за межі валентних зон, коли відгук різко зменшується. При прямих процесах розсіяння утворена після рекомбінації електрон-діркова пара зазнає процесів розсіяння та релаксацію і може охопити усі доступні для неї стани у валентній зоні. Відповідно

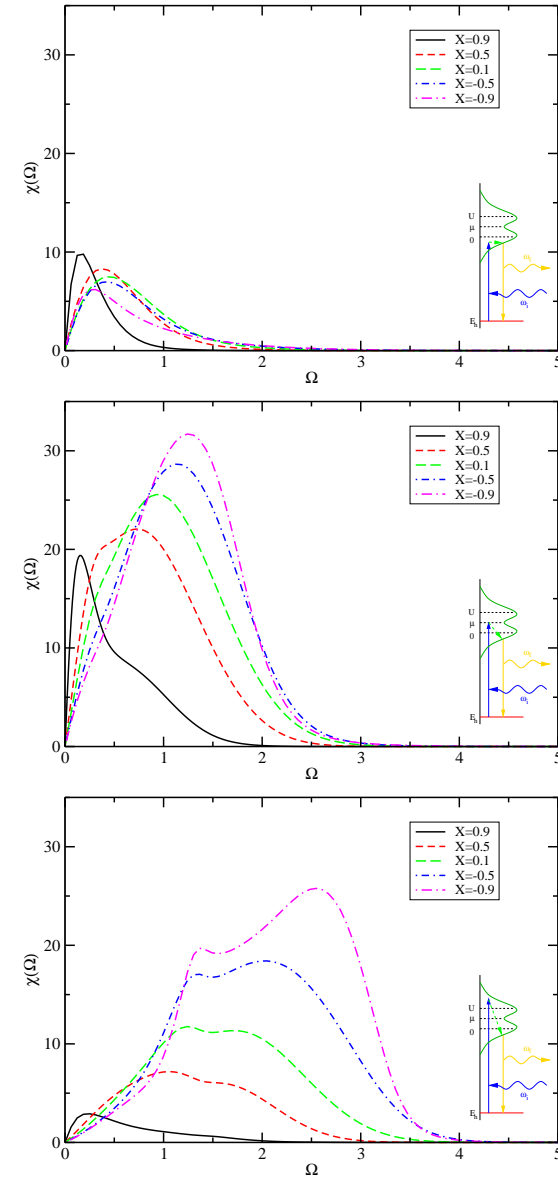


Рис. 8. Функції відгуку для резонансного непружного розсіяння Рентгенових променів для різних енергій збудження (зверху вниз): $\omega_i + \mu - E_h = -1, 0$ та 1 ($U = Q_d = 1$, $T = 0.3$, $X(\mathbf{q}) = \frac{1}{D} \sum_{\alpha} \cos q_{\alpha}$).

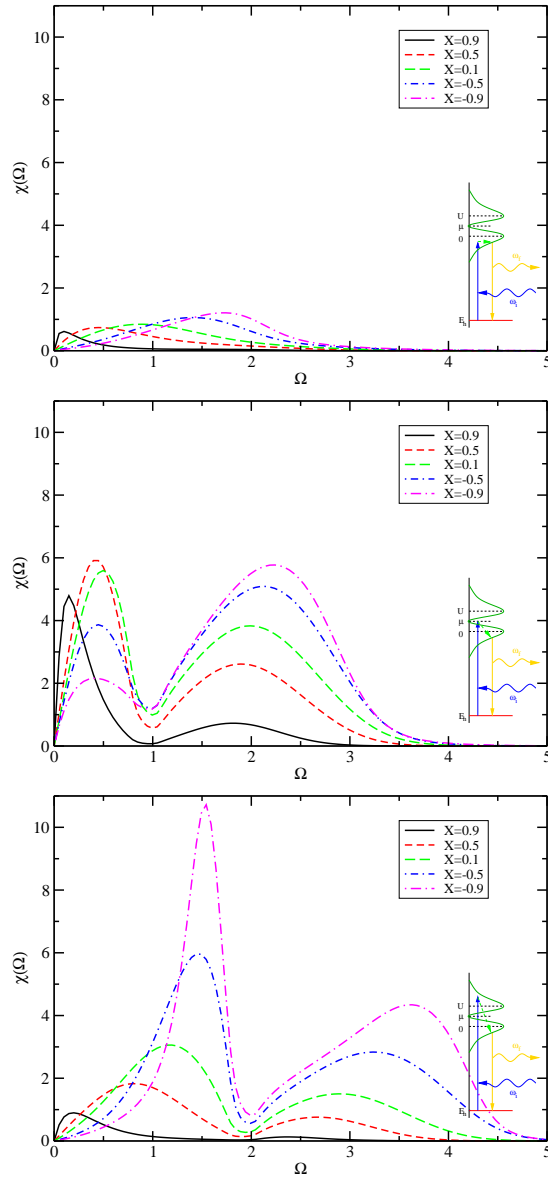


Рис. 9. Функції відгуку для резонансного непружного розсіяння Рентгенових променів для різних енергій збудження (зверху вниз): $\omega_i + \mu - E_h = -1, 0$ та 1 ($U = Q_d = 2$, $T = 0.6$, $X(\mathbf{q}) = \frac{1}{D} \sum_{\alpha} \cos q_{\alpha}$).

при більшій енергії збудження електрон-діркова пара може охопити більше станів, а відповідні спектри непружного розсіяння містять більше інформації про багаточастинкову динаміку валентних зон. Це зокрема видно на приведених рисунках, де при великих значеннях енергії фотонів на спектрах проявляється псевдощілина для випадку $U = Q_d = 1$ (рис. 8) або Моттова щілина для випадку сильнокорельованого діелектрика $U = Q_d = 2$ (рис. 9).

Література

1. Sparks C. J. Inelastic resonance emission of X rays: Anomalous scattering associated with anomalous dispersion // *Phys. Rev. Lett.* — 1974. — Vol. 33, no. 5. — Pp. 262–265.
2. Bannett Y. B., Freund I. Resonant X-ray Raman scattering // *Phys. Rev. Lett.* — 1975. — Vol. 34, no. 6. — Pp. 372–376.
3. Eisenberger P., Platzman P. M., Winick H. X-ray resonant Raman scattering: Observation of characteristic radiation narrower than the lifetime width // *Phys. Rev. Lett.* — 1976. — Vol. 36, no. 11. — Pp. 623–626.
4. Resonant Inelastic X-ray Scattering Studies of Elementary Excitations / L. J. P. Ament, M. van Veenendaal, T. P. Devereaux et al. // *Review of Modern Physics.* — 2010. — (in print); Preprint arXiv:1009.3630 [cond-mat.str-el].
5. Polarization and resonance properties of magnetic X-ray scattering in holmium / D. Gibbs, D. R. Harshman, E. D. Isaacs et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 1988. — Vol. 61, no. 10. — Pp. 1241–1244.
6. X-ray resonance exchange scattering / J. P. Hannon, G. T. Trammell, M. Blume, D. Gibbs // *Phys. Rev. Lett.* — 1988. — Vol. 61, no. 10. — Pp. 1245–1248.
7. Fabrizio M., Altarelli M., Benfatto M. X-ray resonant scattering as a direct probe of orbital ordering in transition-metal oxides // *Phys. Rev. Lett.* — 1998. — Vol. 80, no. 15. — Pp. 3400–3403.
8. Castleton C. W. M., Altarelli M. Orbital ordering in the manganites: Resonant x-ray scattering predictions at the manganese L_{II} and L_{III} edges // *Phys. Rev. B.* — 2000. — Vol. 62, no. 2. — Pp. 1033–1038.
9. Soft X-ray resonant diffraction study of magnetic and orbital correlations in a manganite near half doping / K. J. Thomas, J. P. Hill, S. Grenier et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2004. — Vol. 92, no. 23. — P. 237204.
10. Kotani A., Shin S. Resonant inelastic x-ray scattering spectra for

- electrons in solids // *Rev. Mod. Phys.* — 2001. — Vol. 73, no. 1. — Pp. 203–246.
11. X-ray resonant Raman scattering in NiO: Resonant enhancement of the charge-transfer excitations / C.-C. Kao, W. A. L. Caliebe, J. B. Hastings, J.-M. Gillet // *Phys. Rev. B.* — 1996. — Vol. 54, no. 23. — Pp. 16361–16364.
 12. Resonant inelastic X-ray scattering from valence excitations in insulating copper oxides / P. Abbamonte, C. A. Burns, E. D. Isaacs et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 1999. — Vol. 83, no. 4. — Pp. 860–863.
 13. Momentum dependence of charge excitations in the electron-doped superconductor $Nd_{1.85}Ce_{0.15}CuO_4$: A resonant inelastic X-ray scattering study / K. Ishii, K. Tsutsui, Y. Endoh et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2005. — Vol. 94, no. 20. — P. 207003.
 14. Incident energy and polarization-dependent resonant inelastic x-ray scattering study of La_2CuO_4 / L. Lu, J. N. Hancock, G. Chabot-Couture et al. // *Phys. Rev. B.* — 2006. — Vol. 74, no. 22. — P. 224509.
 15. Resonant X-ray fluorescence spectroscopy of correlated systems: A probe of charge-transfer excitations / S. M. Butorin, D. C. Mancini, J.-H. Guo et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 1996. — Vol. 77, no. 3. — Pp. 574–577.
 16. Half-metallic electronic structure of CrO_2 in resonant scattering / E. Z. Kurmaev, A. Moewes, S. M. Butorin et al. // *Phys. Rev. B.* — 2003. — Vol. 67, no. 15. — P. 155105.
 17. Localized electronic excitations in NiO studied with resonant inelastic X-ray scattering at the Ni M threshold: Evidence of spin flip / S. G. Chiuzbăian, G. Ghiringhelli, C. Dallera et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2005. — Vol. 95, no. 19. — P. 197402.
 18. Orbital excitations in $LaMnO_3$ studied by resonant inelastic x-ray scattering / T. Inami, T. Fukuda, J. Mizuki et al. // *Phys. Rev. B.* — 2003. — Vol. 67, no. 4. — P. 045108.
 19. $d-d$ excitations in manganites probed by resonant inelastic x-ray scattering / S. Grenier, J. P. Hill, V. Kiryukhin et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2005. — Vol. 94, no. 4. — P. 047203.
 20. Excitation-energy dependence in the $L_{2,3}$ fluorescence spectrum of Si / J.-E. Rubensson, D. Mueller, R. Shuker et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 1990. — Vol. 64, no. 9. — Pp. 1047–1050.
 21. Resonant inelastic x-ray scattering spectra of magnesium diboride / K. Kokko, V. Kulmala, J. A. Leiro, W. Hergert // *Phys. Rev. B.* — 2003. — Vol. 68, no. 5. — P. 052503.
 22. New spectroscopy solves an old puzzle: The Kondo scale in heavy

- fermions / C. Dallera, M. Grioni, A. Shukla et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2002. — Vol. 88, no. 19. — P. 196403.
23. *van den Brink J., van Veenendaal M.* Theory of indirect resonant inelastic X-ray scattering // *Journal of Physics and Chemistry of Solids.* — 2005. — Vol. 66, no. 12. — Pp. 2145 – 2149.
 24. *van den Brink J., van Veenendaal M.* Correlation functions measured by indirect resonant inelastic X-ray scattering // *EPL (Europhysics Letters).* — 2006. — Vol. 73, no. 1. — Pp. 121–127.
 25. *Falicov L. M., Kimball J. C.* Simple model for semiconductor-metal transitions: SmB_6 and transition-metal oxides // *Physical Review Letters.* — 1969. — Vol. 22, no. 19. — Pp. 997–999.
 26. *Freericks J. K., Zlatić V.* Exact dynamical mean-field theory of the Falicov-Kimball model // *Reviews of Modern Physics.* — 2003. — Vol. 75, no. 4. — Pp. 1333–1382.
 27. *Shvaika A. M., Freericks J. K.* F-electron spectral function of the Falicov-Kimball model and the Wiener-Hopf sum equation approach // *Condensed Matter Physics.* — 2008. — Vol. 11, no. 3. — Pp. 425–442.
 28. *Nozières P., De Dominicis C. T.* Singularities in the X-ray absorption and emission of metals. III. One-body theory exact solution // *Physical Review.* — 1969. — Vol. 178, no. 3. — Pp. 1097–1107.
 29. *Каданов Л., Бейм Г.* Квантовая статистическая механика. — М.: Мир, 1964. — 255 с.
 30. *Келдыш Л. В.* Диаграммная техника для неравновесных процессов // *Журнал экспериментальной и теоретической физики.* — 1964. — Т. 47, № 4. — С. 1515–1527.
 31. *Shvaika A. M.* Dynamical susceptibilities in a strong coupling approach // *Physica C: Superconductivity.* — 2000. — Vol. 341–348, no. 1. — Pp. 177–178.
 32. *Freericks J. K., Miller P.* Dynamical charge susceptibility of the spinless Falicov-Kimball model // *Physical Review B.* — 2000. — Vol. 62, no. 15. — Pp. 10022–10032.
 33. *Shvaika A. M.* Dynamical susceptibilities in strong coupling approach: General scheme and Falicov-Kimball model // *Journal of Physical Studies.* — 2001. — Vol. 5, no. 3/4. — Pp. 349–354.