

КОМБІНАЦІЙНЕ РОЗСІЯННЯ СВІТЛА В ЛОКАЛЬНО-АНГАРМОНІЧНИХ КРИСТАЛІЧНИХ СИСТЕМАХ З СИЛЬНИМИ ЕЛЕКТРОННИМИ КОРЕЛЯЦІЯМИ: КВАНТОВО-СТАТИСТИЧНИЙ ПІДХІД.

Досліджуються ангармонічні фононні внески до комбінаційного розсіяння світла у локально-ангармонічних кристалічних системах з сильною короткосяжною електронною кореляцією в рамках псевдоспін-електронної моделі з тунельним розщепленням рівнів при сильній псевдоспін-електронній взаємодії. Прикладами таких систем можуть бути високотемпературні надпровідники типу YBaCuO (ангармонічні коливання апексного кисню O4) а також кристали з водневими зв'язками. Для розрахунку диференціального перерізу розсіяння використано метод, який є певною альтернативою до стандартного підходу, що використовується для опису розсіяння [1,2]; встановлено зв'язок між цими двома підходами. Диференціальний переріз розсіяння виражається формулою

$$\frac{\partial^2 \sigma}{\partial \Omega \partial \omega_2} = \frac{1}{(4\pi \epsilon_0)^2} \sqrt{\frac{\epsilon_1}{\epsilon_2}} \frac{\omega_2^3 \omega_1}{\hbar^2 c^4} \sum_{\alpha\beta\alpha'\beta'} e_{1\alpha} e_{2\beta} e_{1\alpha'} e_{2\beta'} H_{k_2, k_1}^{\beta'\alpha', \beta, \alpha}(\omega_1, \omega_2), \quad (1)$$

тут \vec{e}_1, \vec{e}_2 векторами поляризації, ω_1, ω_2 частоти падаючого і розсіяного світла, $\epsilon_{1,2} \equiv \epsilon(\omega_1, \omega_2)$, $H_{k_2, -k_1; -k_2, k_1}^{\beta'\alpha', \beta, \sigma}(\omega_1, \omega_2)$ -тензор розсіяння

$$H_{k_2, -k_1; -k_2, k_1}^{\beta'\alpha', \beta, \sigma}(\omega_1, \omega_2) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i(\omega_1 - \omega_2)t} \langle \hat{P}_{k_2 - k_1}^{\beta'\alpha'}(-\omega_1, t) \hat{P}_{-k_2, k_1}^{\beta\alpha}(\omega_1, 0) \rangle, \quad (2)$$

оператор поляризованості \hat{P} має вигляд:

$$\hat{P}_{k'k}^{\beta\alpha}(\omega, t) = - \int_{-\infty}^{+\infty} ds e^{i\omega(t-s)} \left\{ \left\{ \hat{M}^{\beta}(\vec{k}', t) \mid \hat{M}^{\alpha}(\vec{k}, s) \right\} \right\}, \quad (3)$$

$M(k)$ є фур'є-компонентою дипольного моменту елементарної комірки, символ $\left\{ \left\{ \hat{M}^{\beta}(k', t) \mid \hat{M}^{\alpha}(k, s) \right\} \right\}$ позначає неусереднену двочасову функцію Гріна, означену у такий спосіб:

$$\left\{ \left\{ A(t) \mid B(t') \right\} \right\} = -i\theta(t-t') [A(t), B(t')]. \quad (4)$$

Для побудови оператора поляризованості у явному вигляді використано операторний розклад за степенями електронного переносу. Такий підхід дозволяє уникнути труднощів, пов'язаних із необхідністю розрахунку багаточасових функцій Гріна. Двочасові кореляційні функції, через які при цьому виражається тензор розсіяння, розраховано у рамках узагальненого наближення хаотичних фаз. Таким чином врахована наявність ефективної взаємодії між псевдоспінами через електрони. Враховано псевдоспінові (фононні) та

електронні внески в розсіяння. Досліджено частотну залежність інтенсивності комбінаційного розсіяння світла при різних значеннях параметрів моделі та при різних співвідношеннях між поляризацією падаючого та розсіяного світла (для кристалів типу YBaCuO це відповідає поляризації $(xx+yy)$ у площині CuO та у перпендикулярному (zz) до цієї площини напрямку). Показано, що інтенсивність розсіяння для випадку (zz) поляризації є на порядок більшою ніж у випадку $(xx+yy)$ поляризації. Отримані спектри порівнюються з експериментальними.

[1] B.S.Shastry, B.I.Shaiman. Phys. Rev. Lett., vol. 65, N. 8, p.1068, 1990

[2] J.K.Freericks, T.P.Deveraux. Phys. Rev. B, vol. 64, p. 125110, 2001