

KfK 2630
April 1978

Phononendispersion und Streugesetz $S(\underline{k}, \omega)$ für ein quasi-eindimensionales Peierls-System

K. Käfer
Institut für Angewandte Kernphysik

Kernforschungszentrum Karlsruhe

Als Manuskript vervielfältigt
Für diesen Bericht behalten wir uns alle Rechte vor

KERNFORSCHUNGSZENTRUM KARLSRUHE GMBH

KERNFORSCHUNGSZENTRUM KARLSRUHE
Institut für Angewandte Kernphysik

KfK 2630

Phononendispersion und Streugesetz $S(\underline{k}, \omega)$ für ein quasi-eindimensionales
Peierls-System^{*)}

von

Klaus Käfer

Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe
^{*)} von der Fakultät für Physik der Universität Karlsruhe (T.H.)
genehmigte Dissertation

Zusammenfassung

Eindimensionale Elektron-Phonon-Systeme neigen zu ausgeprägten $2k_F$ -Phononenanomalien. Im Hinblick darauf wird in dieser Arbeit die Phononendispersion für ein System linearer Ketten mikroskopisch berechnet. Die Ketten befinden sich in der Peierlsphase, d.h. sie besitzen in Kettenrichtung eine $\frac{2\pi}{2k_F}$ -periodische, mit der Grundstruktur inkommensurable Überstruktur. Die Phase der Überstruktur ist auf allen Ketten gleich.

Die Phononenrenormierung wird in random-phase approximation (RPA) und für $T=0$ durchgeführt. Dabei sollen die Elektronen auf die Umgebung der Ketten lokalisiert sein, längs der Ketten werden sie als nahezu-freie Elektronen (mit Peierlsgap an der Fermikante) beschrieben. Bei der Ermittlung der Phononfrequenzen wird der Einfluß der Elektron-Elektron-Wechselwirkung und der Streuung am Gitter (Umklapp-Prozesse) insbesondere auf die Phononen am Überstrukturpunkt $(0,0,2k_F)$ (Phasen- und Amplitudenmode) berücksichtigt. Die Elektron-Elektron-Wechselwirkung bewirkt zum einen eine starke Abhängigkeit der Phasenmodedefrequenz von der Richtung des Wellenzahlvektors relativ zum Überstrukturpunkt, zum anderen verursacht sie durch ein generelles Anheben der Phononfrequenzen auch für die "transversale" Phasenmode eine von Null verschiedene Frequenz. Im Gegensatz zum Anheben der "transversalen" Phasenmode durch Umklapp-Prozesse wird durch diesen Mechanismus die Fröhlich-Supraleitung jedoch nicht zerstört, wie eine Berechnung der dielektrischen Funktion und daraus der Leitfähigkeit ergibt.

Auf der Grundlage der so gewonnenen Phonondispersion wird das Neutronenstreugesetz $S(\underline{k},\omega)$ ermittelt. Phasen- und Amplitudenmode tragen am Überstrukturpunkt mit gleichem Gewicht bei, beim Übergang vom Bereich der Anomalie in den "normalen" Bereich verlagert sich dieses Gewicht jedoch schnell auf nur einen Zweig. Durch Falten von $S(\underline{k},\omega)$ mit einer instrumentellen Auflösungsellipse kann schließlich mit den Materialdaten des linearen Peierls-Halbleiters $K_2Pt(CN)_4Br_{0.3} \cdot 3.2H_2O$ (KCP) ein Intensitäts-Höhenliniendiagramm inelastisch gestreuter Neutronen erhalten werden, das mit den tatsächlich gemessenen Intensitätsprofilen qualitativ gut übereinstimmt.

Ergänzend wird untersucht, wie sich eine ungeordnete Verteilung der Überstrukturphasen im Kettensystem auf die Phonondispersion auswirkt. In diesem Fall schließt sich die Lücke in der Phonondispersion zwischen Phasen- und Amplitudenmode. Außerdem verschwindet die starke Abhängigkeit der Phasenmodedefrequenz von der Richtung des Wellenzahlvektors, ebenso ihre Infrarot-Aktivität. Beide Aussagen stimmen mit den experimentellen Daten von KCP überein.

Phonon Dispersion and Neutron Scattering Law $S(\underline{k},\omega)$ for a Quasi-One-dimensional Peierls-System

Abstract

One-dimensional electron-phonon systems tend to develop pronounced $2k_F$ -phonon anomalies. Under this aspect the phonon dispersion of a system of linear chains is microscopically calculated in this treatise. The chains are in the Peierls-phase, i.e. possess a $\frac{2\pi}{2k_F}$ - periodic superstructure in chain direction which is incommensurate with the basic structure. The phase of the superstructure is identical in all chains.

The phonon frequencies are renormalized using the random-phase approximation (RPA) for $T = 0$. The electrons are localized to the vicinity of the chains, along the chains they are characterized as nearly-free electrons (with Peierls-gap at the Fermi-edge). In the determination of the phonon frequencies the influence of the electron-electron interaction and of Umklapp-processes is, especially with regard to the phonons at the superstructure-point $(0,0,2k_F)$ (phase- and amplitude-mode), taken into account. On one hand the electron-electron interaction causes a strong dependence of the phase-mode frequency on the direction of its wave-vector relative to the superstructure-point, and on the other hand it leads by a general raising of the phonon-frequencies to a non-zero frequency also for the "transverse" phase-mode. In contrast to the raising of the "transverse" phase-mode by Umklapp-processes the Fröhlich-superconductivity is not destroyed by this mechanism. This can be shown by a calculation of the dielectric function and thereby of the conductivity.

On the basis of the so determined phonon dispersion the neutron scattering law $S(\underline{k},\omega)$ is obtained. At the superstructure-point phase- and amplitude-mode contribute with equal weight. Going from the anomaly to the "normal" region, however, this weight is shifted rapidly to one branch only. Convoluting $S(\underline{k},\omega)$ with an instrumental resolution-ellipsoid and using the data of the linear Peierls-semiconductor $K_2Pt(CN)_4Br_{0.3} \cdot 3.2H_2O$ (KCP) one can finally obtain an intensity contour-diagram of inelastically scattered neutrons, which is in good qualitative agreement with the actually measured intensity profiles.

In addition it is investigated, how a disordered distribution of superstructure phases within the chain system affects the phonon dispersion. It is shown that in this case the gap in the phonon dispersion between phase- and amplitude-mode disappears. Moreover, the strong angular dependence of the phase-mode frequency is destroyed, as well as its infrared-activity. Both results agree with the experimental data of KCP.

I n h a l t s v e r z e i c h n i s

Phononendispersion und Streugesetz $S(\underline{k},\omega)$ für ein quasi-eindimensionales Peierls-System

	Seite
I. Einführung.....	1
1. Einige Konzepte aus der Theorie der eindimensionalen Metalle.....	2
2. Hinweise auf eindimensionalen Charakter von KCP, Ziel der Arbeit..	5
II. Berechnung der Phononendispersion.....	8
A) M o d e l l	
3. Elektronen.....	9
4. Unrenormierte Gitterschwingungen.....	16
5. Elektron-Phonon-Kopplung.....	17
6. Elektron-Elektron-Wechselwirkung.....	24
B) M e t h o d e	
7. Renormierung des Phononenpropagators, qualitative Resultate.....	26
C) R e c h n u n g u n d n u m e r i s c h e E r g e b n i s s e	
8. Normale und anomale Polarisationsbeiträge, Fröhlich-Modell.....	35
9. Coulomb-Renormierung.....	44
10. Umklapp-Prozesse.....	54
11. Einfluß der Überstruktur-Phasen-Korrelation auf die Phononendi- spersion.....	60
III. Neutronen-Streugesetz $S(\underline{k},\omega)$	67
12. Zurückführung von $S(\underline{k},\omega)$ auf die renormierten Phononoperatoren und -frequenzen.....	68
13. Faltung von $S^1(\underline{k},\omega)$ mit instrumenteller Auflösungsellipse, numerische Resultate.....	73

Anhang

Einfluß der Phasenmode auf Leitfähigkeit und dielektrische
Funktion.

Literaturverzeichnis

I. Einführung

Als eindimensional oder quasi-eindimensional bezeichnen wir Stoffe, deren ausgeprägte Anisotropie in Struktur und anderen physikalischen Eigenschaften, z.B. in der Leitfähigkeit, es nahelegen, sie sich als (regelmäßige) Anordnung von nur schwach wechselwirkenden Atom- oder Molekülketten vorzustellen.

In den letzten Jahren wurde eine ganze Reihe von solchen Stoffen bekannt /1/. Am eingehendsten untersucht sind organische Verbindungen (Beispiel TTF-TCNQ /1/) und Substanzen aus der Klasse der Krogmann-Salze, wie $K_2Pt(CN)_4Br_{0.3} \cdot 3.2H_2O$ (KCP), dessen Grundstruktur in Abb. 1 skizziert ist. Die Ketten in dieser Verbindung werden aus übereinander geschichteten, ebenen $Pt(CN)_4$ -Komplexen gebildet. KCP wird die physikalische Referenzsubstanz sein, auf die wir die in dieser Arbeit gewonnenen Resultate anwenden.

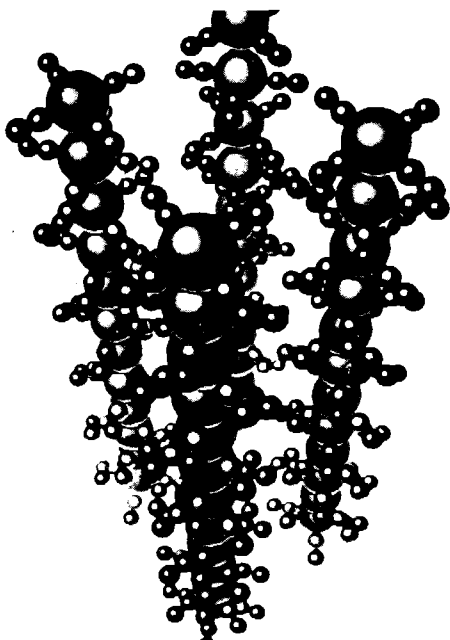


Abb. 1

Grundstruktur von $K_2Pt(CN)_4Br_{0.3} \cdot 3.2H_2O$ (KCP). Große Kugeln symbolisieren die Pt-Ionen, seitliche kleine Kugeln die CN-Liganden.

Das experimentelle Interesse an sehr anisotropen Verbindungen wurde durch theoretische Untersuchungen hervorgerufen, die ausgeprägte, spezifisch "eindimensionale" Effekte erwarten lassen. Darauf gehen wir im folgenden Abschnitt ein. Die Gründe, KCP als eindimensionale Modellsubstanz anzusehen, und seine Verbindung zum Thema dieser Arbeit werden im darauffolgenden Abschnitt dargelegt.

1. Einige Konzepte aus der Theorie der eindimensionalen Metalle

Ein anisotroper Kristallaufbau spiegelt sich in der elektronischen Bandstruktur wieder. Der in Kettenrichtung im Vergleich zur dazu Senkrechten große Überlapp atomarer Wellenfunktionen kann, wie in KCP, zur Ausbildung eindimensionaler Bänder führen. Die Bandenergie $E(\underline{k})$ hängt dann nahezu allein von der zur Kettenrichtung parallelen Komponente k_z des Wellenzahlvektors \underline{k} ab.

Physikalisch interessant werden diese Stoffe besonders dann, wenn das eindimensionale Leitungsband nur teilweise gefüllt ist. Charakteristisch dafür ist eine hohe, zugleich stark anisotrope Leitfähigkeit (KCP: $\sigma_{\parallel} \approx 10^2 (\Omega \text{ cm})^{-1}$, $\sigma_{\perp} \approx 10^{-4} \sigma_{\parallel}$). Wir sprechen dann von 1-D Metallen oder linearen Leitern.

Die Fermifläche linearer Leiter besteht aus koplanaren Flächen im Abstand $\Delta k_z = 2k_F$ (Abb. 2) (k_F ist die Fermi-Wellenzahl parallel zur z-Achse).

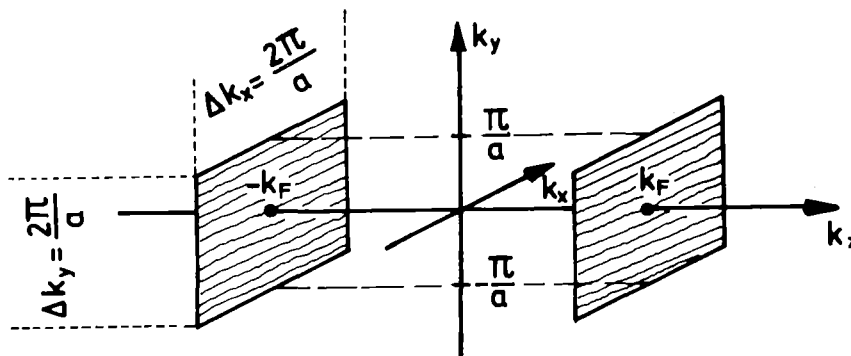


Abb. 2 Fermifläche eines linearen Leiters

Bei $T = 0$ nimmt die Möglichkeit, niederenergetische Teilchen-Loch-Paare mit Impuls q_z anzuregen, für $q_z \rightarrow 2k_F$ sprunghaft zu: Die Polarisierbarkeit des Elektronensystems durch Felder mit Wellenzahl $2k_F$ und geringer Frequenz ($\hbar\omega \ll \epsilon_F$) ist extrem groß.

Diese Besonderheit quasi-eindimensionaler Elektron-Phonon-Systeme führt nun zur Vorhersage ungewöhnlicher Eigenschaften, die wir im folgenden unter den Stichworten "Riesige Kohnanomalie", "Peierlsüberstruktur", "Fröhlich-Supraleitung" skizzieren wollen.

Riesige Kohmanomalie /2/:

Wegen des hohen Abschirmvermögens eindimensionaler Elektronen bei $q_z = 2k_F$ kommt der Elektron-Phonon-Kopplung dort besondere Bedeutung zu. Die interatomaren Kraftkonstanten werden stark reduziert und lassen einen trichterförmigen Einbruch in der longitudinalen Phononendispersion erwarten. Mit sinkender Temperatur wird dieser Trichter tiefer, bis wir bei einer gewissen Temperatur T_p schließlich die Phononfrequenz $\omega(q_z = 2k_F) = 0$ /3/ und damit eine statische

Peierlsüberstruktur /4/

erhalten. Dem bisher homogenen Jellium-Hintergrund (äquidistanten Ionen-gitter) wird eine sinusförmige $2k_F$ -periodische Überstruktur längs der Kettenrichtung aufgeprägt. Die Auslenkung der einzelnen Teilchen entspricht dabei den Eigenvektoren des $\omega = 0$ -Phonons. Peierls erwartet eine solche Überstruktur aufgrund eines Energie-Argumentes: Eine Modulation des Jelliums (Gitters) erfordert zwar Deformationsenergie, hat aber bei $k_z = \pm k_F$ ein Gap in der Elektronendispersion und damit ein energetisches Absenken der Elektronenzustände mit $|k_z| < k_F$ zur Folge. Mit sinkender Temperatur sind nahezu ausschließlich diese Zustände besetzt, und die gewonnene Energie kompensiert die Deformationsenergie des Gitters. In einem einfachen Jellium-Modell ohne Coulomb-Wechselwirkung führt diese Überlagerung zu einer BCS-artigen Gapgleichung /3, 5, 6/.

Fröhlich-Supraleitung /7/:

Betrachten wir ein Elektron-Jellium-System in der Peierls-Phase. Wegen des homogenen Ladungshintergrundes ist keine Phase der Überstruktur energetisch ausgezeichnet. Ein Verschieben der Ladungsdichtewelle (LDW), als die die Überstruktur angesehen werden kann, bewirkt nun einen negativen Ladungstransport: Während sich der elektronische Anteil der LDW starr durch den Kristall bewegt, arrangiert sich der (positive) Ladungshintergrund nur um. (Bildlicher Vergleich: Verschieben eines Wellblechs auf einem Wasserbett.) Während diesem Durchlaufen der LDW ändert sich die potentielle Energie des Gesamtsystems nicht, die kinetische Energie $E_{kin} = N \frac{m}{2} v^2 = \frac{P^2}{2mN}$ wird bei vorgegebenem Gesamtimpuls P für große Teilchenzahlen N (m : effektive Elektronenmasse, v : Geschwindigkeit) sehr klein. Wegen des Gaps an der Fermikante kann

diese niederenergetische Anregung ($N \rightarrow \infty$; $E = 0$) nicht in Teilchen-Loch-Paare zerfallen und läuft, einmal angeregt, ungedämpft weiter: Fröhlich schlug dies als Supraleitungsmechanismus vor /7/. Wegen der recht einschneidenden Voraussetzungen seines Modells (Jellium-Hintergrund, keine Elektron-Elektron-Wechselwirkung) kann diese Theorie jedoch nicht ohne weiteres auf reale Elektron-Phonon-Systeme übertragen werden. Zwar ist die Elektron-Elektron-Wechselwirkung auf den Fröhlich-Supraleitungs-Mechanismus ohne Einfluß, da der Gesamtimpuls der kollektiven Anregung durch Coulombkräfte nicht wegdiszipieren kann, ein gitterförmiger Ladungshintergrund ändert die Situation jedoch gravierend. Es kann jetzt energetisch vorteilhafte Phasenlagen der LDW geben und die LDW schwingt dann nur noch um eine dieser Ruhelagen. Allerdings könnte man durch ein kurzzeitig angelegtes äußeres Feld der LDW noch genügend kinetische Energie vermitteln, um diese Potentialmulden zu überwinden, zumal die Tiefe dieser Mulden von der Kommensurabilität zwischen Gitterkonstante und Fermiwellenzahlvektor abhängt und mit geringer werdender Kommensurabilität rasch gegen Null strebt /8/. Der Supraleitungsmechanismus wäre prinzipiell also noch intakt. Er wird jedoch durch die nun auftretenden Umklapp-Prozesse zerstört, über die die durchlaufende LDW Impuls an den Kristall abgeben kann und damit abgebremst wird, falls nicht dauernd ein äußeres Feld Impuls und Energie nachliefert: Die "Fröhlich-Mode" führt nur noch zu endlicher Leitfähigkeit. (Diesen "destruktiven" Effekt von Umklapp-Prozessen kennen wir bereits aus der Theorie der "normalen" Leitfähigkeit metallischer Elektron-Phonon-Systeme /4/.)

Alle diese Überlegungen gingen von einem mean-field-Bild aus, d.h. thermische Fluktuationen, die insbesondere den Peierls-Übergang beeinflussen würden, wurden außer acht gelassen. Tatsächlich aber können Fluktuationen für eindimensionale Systeme a priori nicht vernachlässigt werden. Ein Theorem von Landau /9/ sagt sogar, daß in streng eindimensionalen Systemen Phasenübergänge für $T \neq 0$ aufgrund solcher Fluktuationen unmöglich sind. In realen Kristallen ist jedoch immer ein gewisses Maß an 3-Dimensionalität, d.h. Interketten-Wechselwirkung, vorhanden und läßt deshalb erwarten, daß bei genügend tiefen Temperaturen eine mean-field Theorie wieder ihre Berechtigung erlangt. Eine solche Wechselwirkung erlaubt z.B. einen Peierls-übergang auch für $T \neq 0$. Die Übergangstemperatur liegt allerdings unter der im mean-field-Bild erwarteten /10/.

2. Hinweise auf eindimensionalen Charakter von KCP, Ziel der Arbeit

In der Möglichkeit, die geschilderten "eindimensionalen" Phänomene experimentell zu untersuchen, liegt das Interesse an Stoffen wie KCP begründet. In KCP wurde mit Neutronen- und Röntgen-Streuexperimenten eine Peierlsüberstruktur bereits bei Zimmertemperatur festgestellt /11/. Für Temperaturen $T < 100$ K lassen sich untere Grenzen für die Korrelationslänge ξ_{\parallel} der Überstruktur (ÜS) längs der Ketten und für die Lebensdauer τ der ÜS mit $\tau > 10^{-8}$ sec und $\xi_{\parallel} > 100$ Pt-Pt-Abstände angeben /12/, /13/. Im Gegensatz dazu bleibt die Korrelationslänge ξ_{\perp} der Überstruktur-Phasen senkrecht zur Kettenrichtung für alle gemessenen T ($T \geq 4$ K) kleiner als 8 Pt-Pt-Abstände in dieser Richtung. Ob dies eine Folge der oben erwähnten 1-D Fluktuationen ist, die dann allerdings sehr "langsam" sein müßten, oder auf Fehlordnung der anderen Kristallbestandteile beruht /14/, konnte bisher nicht geklärt werden. Ein weiterer Hinweis auf die "Eindimensionalität" von KCP ist, daß in KCP erstmals eine ausgeprägte $2k_F$ -Anomalie in der Phononendispersion gefunden wurde /15/. Die mit inelastischer Neutronenstreuung gemessene Phononendispersion und ein Höhenliniendiagramm der Streuintensität im Bereich der Anomalie für $T = 60$ K ist in Abb. 3 a) und b) dargestellt /13/.

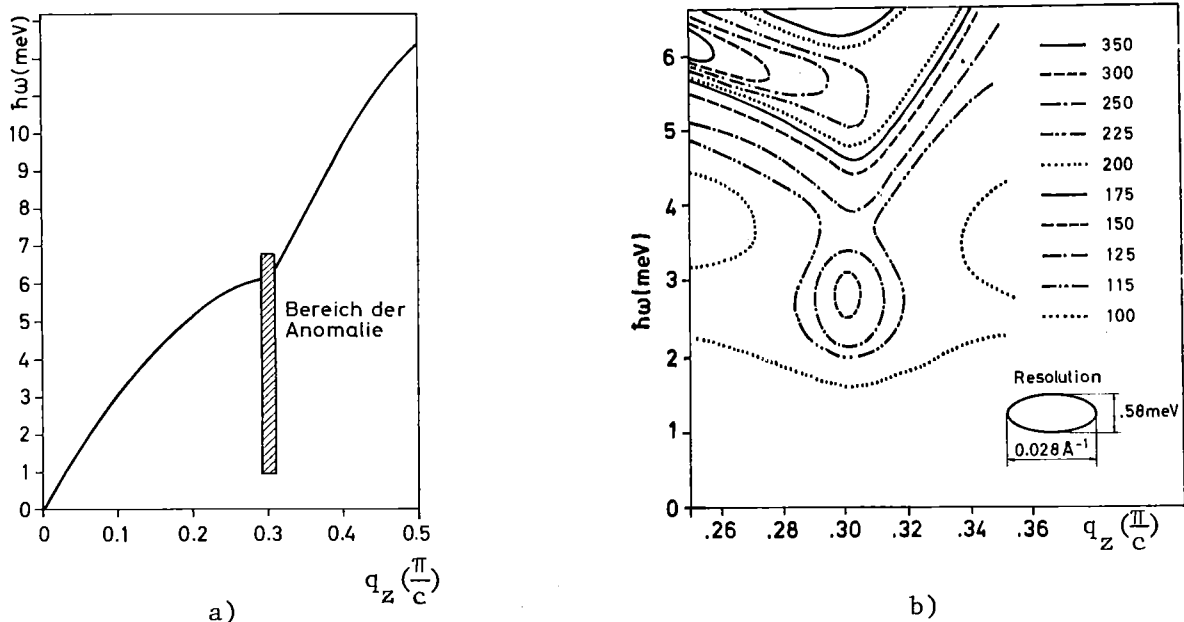


Abb. 3

- a) Dispersion des longitudinal akustischen Phonons in der $(0,0,q_z)$ -Richtung in KCP ($T = 60$ K)
- b) Höhenliniendiagramm der inelastisch gestreuten Intensität im Bereich der Anomalie bei $(0.5,0.5,2k_F)$. Das Diagramm bei $(0,0,2k_F)$ zeigt keine qualitativen Unterschiede, was die betrachtete Anomalie angeht, wird jedoch durch das Kreuzen eines anderen Zweiges kompliziert. (q_z ist in reduzierten Einheiten angegeben, $2k_F \hat{=} 0.3$, s.S. 8)

Da die Anomalie auf einen im Vergleich zur instrumentellen Auflösung sehr engen q_z -Bereich beschränkt ist, ist eine unmittelbare Zuordnung der gemessenen Intensitäten zu einer Dispersionskurve nicht möglich. Ungeklärt ist insbesondere die Verbreiterung des Teils des Höhenliniendiagramms, der wie die Fortsetzung der "normalen" Phononendispersion aussieht, und die Ursache der niederenergetischen Intensität bei ca. 2.5 meV.

Ziel dieser Arbeit ist es, mit Hilfe eines gitterdynamischen Modells für diese Anomalie das Neutronenstreugesetz $S(\underline{k}, \omega)$ aufzustellen und die Interpretierbarkeit der inelastischen Neutronen-Streudaten von KCP /15/, /16/ im Rahmen der geschilderten Konzepte zu untersuchen.

Da für $T < 100$ K die Peierlsphase längs der Ketten gut etabliert ist, wird die mögliche Rolle der Fröhlich-Mode zur Erklärung der niederenergetischen Intensität interessieren. Daß die durch diese Anregung verursachten Dichteschwankungen im Elektron-Ion-System durch Neutronenstreuung prinzipiell beobachtbar sind, wurde von P.A. Lee, T.M. Rice und P.W. Anderson (LRA) in einer grundlegenden Arbeit /8/, die auch Ausgangspunkt dieser Untersuchung war, bewiesen. Sie zeigten, daß Fröhlich's Mode einem Phonon des Peierlssystems ("Phasen-Mode" genannt) bei $q_z = 2k_F$ äquivalent ist und damit mit gleichem Gewicht wie "normale" Phononen ins Neutronenstreugesetz $S(\underline{k}, \omega)$ eingeht. Trotzdem blieb der Einwand bestehen, daß man wegen des nach LRA steilen Anstiegs der Phonondispersion bei $q_z = 2k_F$ (/8/, s. Abschnitt 8) und der damit geringen Phononzustandsdichte zu geringe Streuintensität erhalten würde, um damit die Phasenmode beobachten zu können (s. Kap. III).

Diese Fragen sollen in dieser Arbeit zum einen dadurch geklärt werden, daß wir die Phonondispersion über die unmittelbare Umgebung von $q_z = 2k_F$ hinaus verfolgen. Dies gelingt mit einer Methode zur Berechnung der Dispersion (s. Abschnitt 7), die nicht auf den $2k_F$ -Bereich, auf den die LRA-Theorie zugeschnitten ist, beschränkt ist. Zum anderen gehen wir über den Rahmen des Fröhlich-Modells hinaus, d.h. wir berücksichtigen die Elektron-Elektron-Wechselwirkung und - durch Mitnahme von Umklapp-Prozessen - die Gitterstruktur einer realen Substanz (KCP) (Abschnitte 9 und 10). Allein dadurch, ohne Berücksichtigung ähnlicher Effekte durch Störstellen, erhalten wir eine von Null verschiedene Phasenmodedefrequenz bei $q_z = 2k_F$, die sich zunächst mit waagrechter Tangente fortsetzt und so zu verstärkten Intensitäten führt (Kap. III).

Im Anhang berechnen wir die dielektrische Funktion ϵ für ein Peierls-system, um unsere Überlegungen zu bestätigen, daß das Anheben der Phasen-Mode durch die Elektron-Elektron-Wechselwirkung allein nicht zum Verschwinden der Fröhlich-Supraleitung führen. Diese Rechnung erweitert die Arbeiten von LRA /8/ und Schuster /5/ durch eine vollständigere Berücksichtigung der Elektron-Elektron-Wechselwirkung.

In der gesamten Arbeit lassen wir Fluktuationen außer acht. Wir begründen dies mit den gemessenen Untergrenzen für ξ_{\parallel} und τ . In Abschnitt 11 zeigen wir jedoch, wie $\xi_{\perp} \rightarrow 0$, d.h. eine rein statistische Anordnung der ÜS-Phasen senkrecht zur Kettenrichtung, die Phononendispersion modifiziert, und können so qualitativ die Auswirkungen der mit steigender Temperatur verschwindenden Interketten-Phasenkorrelation darstellen. In Abschnitt 11 und im Anhang A machen wir außerdem einige Aussagen zur Interpretation optischer Experimente /17/, /18/ im Fernen-Infrarot-Bereich, die auf der IR-Aktivität der Phasenmode /5/, /8/ beruhen.

II. Berechnung der Phonondispersion

A) Modell

Wir präzisieren in diesem Abschnitt unsere Vorstellungen von einem Peierls-system. Dazu definieren wir Struktur, Elektron- und Phononsystem und ihre Wechselwirkungen.

In Anlehnung an die Struktur von KCP stellen wir uns ein System linearer Ketten vor, jede gebildet aus Ionenrümpfen ($\hat{=}$ Pt), die mit einer Gitterkonstanten $c = 2.87 \text{ \AA}$ aufeinander folgen. Die (gemeinsame) Kettenrichtung definiert die z-Achse unseres Koordinatensystems. Senkrecht dazu, in der x-y-Ebene, sind diese Ketten in einem quadratischen Gitter mit N-N-Abständen $a = 9.87 \text{ \AA}$ angeordnet (Abb. 4).

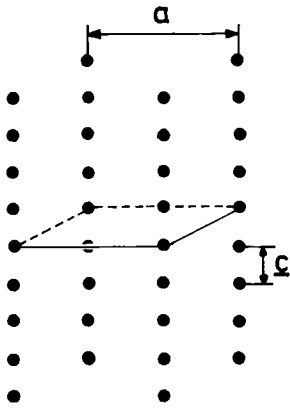


Abb. 4

Idealisierte Struktur einer ein-dimensionalen Substanz.

Dieser Grundstruktur ist in Kettenrichtung eine Peierlsüberstruktur aufgeprägt, d.h. eine sinusförmige Verzerrung der Periode $Q_z = 2k_F$. $2k_F$ soll inkommensurabel mit $\frac{2\pi}{c}$ sein. (In KCP werden dem obersten Band durch die Pt-Atome je 2 Elektronen zur Verfügung gestellt. Wegen der Bildung von Br^- -Ionen bleiben davon nur 1.7 Elektronen pro Einheitszelle, d.h. $k_F = \frac{1.7}{2} \cdot \frac{\pi}{c} \approx 0.93 \text{ \AA}^{-1}$. Im reduzierten Zonenschema erscheint $2k_F$ an den Stellen $\pm |1.7 \frac{\pi}{c} - \frac{2\pi}{c}| = \pm 0.3 \frac{\pi}{c}$. Dieser Wert stimmt mit der beobachteten Lage der Kohnanomalie überein (Abb. 3).) Die Ionenkoordinaten sind demnach gegeben durch

$$\underline{R} = \underline{R}^0 + \underline{R}^P$$

$$\underline{R}^0 = (aj_x, aj_y, cj_z); \quad \underline{R}^P = (0, 0, c\delta \sin(2k_F R_z^0 + \phi_{R_x R_y}))$$

$$j_x, j_y, j_z \in \mathbb{Z}$$

mit der Amplitude $\delta [\text{KCP} \sim 1/\text{o}0]$ und der kettenabhängigen Phase ϕ der Peierls-Überstruktur.

3. Elektronen

Für die elektronischen Wellenfunktionen ist das Potential der Ionen in den Gleichgewichtslagen \underline{R} maßgebend. Auslenkungen aus diesen Ruhelagen durch Gitterschwingungen geben Anlaß zu der in Abschnitt 5) untersuchten Elektron-Phonon-Wechselwirkung.

$U_0(\underline{r})$ läßt sich als Summe der einzelnen Ionenpotentiale schreiben:

$$\begin{aligned}
 U_0(\underline{r}) &= \sum_j u(\underline{r} - \underline{R}_j) = \sum_j \sum_{\underline{q}} u_{\underline{q}} e^{i\underline{q}(\underline{r} - \underline{R}_j)} \\
 &= \sum_{\underline{q}} u_{\underline{q}} e^{i\underline{q}\underline{r}} \sum_j e^{-i\underline{q}\underline{R}_j} (1 - i\underline{q}\underline{R}_j^P + O(\delta^2)) \\
 &\approx N \sum_{\underline{\tau}} u_{\underline{\tau}} e^{i\underline{\tau}\underline{r}} + \sum_{\underline{q}} u_{\underline{q}} e^{i\underline{q}\underline{r}} \sum_j e^{-i\underline{q}\underline{R}_j} (-i\underline{q})\underline{R}_j^P \\
 &= N \sum_{\underline{\tau} = (\tau_x, \tau_y, 0)} u_{\underline{\tau}} e^{i(\tau_x x + \tau_y y)} + N \sum_{\underline{\tau}, \tau_z \neq 0} u_{\underline{\tau}} e^{i\underline{\tau}\underline{r}} + U_0^P(\underline{r}) \\
 &= U_0^J(x, y) + U_0^U(\underline{r}) + U_0^P(\underline{r})
 \end{aligned} \tag{3.1}$$

(N : Anzahl der Gitteratome; $\underline{\tau}$: ganzzahlige Vielfache von $(\frac{2\pi}{a}, \frac{2\pi}{a}, \frac{2\pi}{c})$; j symbolisiert Summation über alle Gitterplätze.)

$U_0^J(x, y)$ ist das Potential einer regelmäßigen Anordnung homogen positiv geladener Schläuche in der x-y-Ebene (Jellium-Modell)[†]. Es läßt sich als Summe von Ketten-Radialpotentialen $\tilde{u}(x, y)$ schreiben:

$$U_0^J(x, y) = \sum_{R_x, R_y} \tilde{u}((x, y) - (R_x, R_y)). \tag{3.2}$$

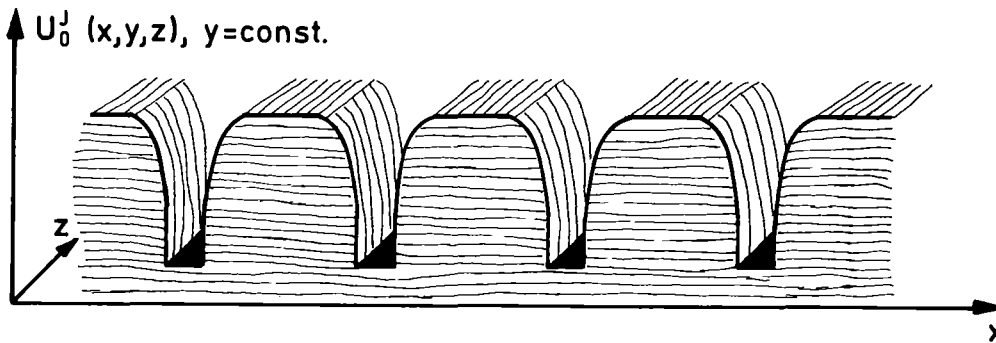


Abb. 5 In z-Richtung homogener Anteil des Elektron-Ion-Potentials.

[†]) $U_0^J(x, y)$ enthält also nicht die Gitterstruktur der Einzelketten. Da wir diese später berücksichtigen, wollen wir trotzdem den Begriff "Kette" verwenden.

$U_o^J(x,y)$ bestimmt zusammen mit der Elektron-Elektron-Wechselwirkung die Ein-elektron-Wellenfunktion des unverzerrten Kettensystems. In z-Richtung sind dies ebene Wellen, senkrecht dazu wählten wir Tight-Binding-Form:

$$\psi_{\underline{k}}^o(\underline{r}) = e^{ik_z z} \sqrt{\frac{1}{N_{\perp}}} \sum_{R_x, R_y} e^{i(k_x R_x + k_y R_y)} L(|(x,y) - (R_x, R_y)|) \quad (3.3)$$

oder in Dirac'scher Schreibweise

$$\psi_{\underline{k}}^o(\underline{r}) = \langle \underline{r} | \underline{k} \rangle_o$$

\underline{k} dient als Blochindex zur Spezifizierung der Wellenfunktion, k_x, k_y sind jedoch keine erhaltenen Quantenzahlen. Den Spinanteil der Wellenfunktion haben wir unterdrückt, die beiden möglichen Spineinstellungen für jeden k -Wert führen zu einem Zusatzfaktor 2 in der Polarisierbarkeit des Elektronensystems. Die Wellenfunktion ist in z-Richtung auf eine Box der Länge $L = 1$ normiert, N_{\perp} ist die Anzahl der Ketten.

Der 2. Teil beschreibt die Lokalisierung der Elektronen auf die Ketten. Die $L(x,y)$ sollen radiale Grundzustände zu den $\hat{u}(x,y)$ sein. Zum Beispiel ist in Anlehnung an die Grundzustands-Wellenfunktion des zweidimensionalen Keplerproblems (vgl. Flügge, Rechenmethoden der Quantentheorie, Heidelberger Taschenbücher, 1965)

$$L(x,y) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{\lambda} e^{-\frac{\sqrt{x^2 + y^2}}{\lambda}} \quad (3.4)$$

Radiale Anregungen werden aus energetischen Gründen vernachlässigt. Auch sollen sich Potentiale und Wellenfunktionen verschiedener Ketten weder untereinander noch wechselseitig überlappen:

$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{u}((x,y) - (R_x, R_y)) \\ L((x,y) - (R_x, R_y)) \end{array} \right\} \cdot \left\{ \begin{array}{l} \tilde{u}((x,y) - (\bar{R}_x, \bar{R}_y)) \\ L((x,y) - (\bar{R}_x, \bar{R}_y)) \end{array} \right\} \sim \delta_{(R_x, R_y), (\bar{R}_x, \bar{R}_y)} \quad (3.5)$$

Die Energieeigenwerte hängen dann nur von der z-Komponente des Impulses ab:
($\hbar = 1$)

$$H(\underline{r}, \underline{p}) \psi_{\underline{k}}^0(\underline{r}) = \left[-\frac{\nabla^2}{2m} + U_0^J(x, y) \right] \psi_{\underline{k}}^0(\underline{r}) = \epsilon_{k_z} \psi_{\underline{k}}^0(\underline{r})$$

$$\epsilon_{k_z} = \frac{k_z^2}{2m} - \epsilon_F$$
(3.6)

(Die radiale Grundzustandsenergie haben wir gleich Null gesetzt und ϵ_{k_z} messen wir von der Fermikante aus.)

In zweitquantisierter Form ist $H(\underline{r}, \underline{p})$

$$H = \sum_{\underline{k}} \epsilon_{k_z} a_{\underline{k}}^+ a_{\underline{k}}$$
(3.7)

Die Erzeuger $a_{\underline{k}}^+$ bzw. Vernichter $a_{\underline{k}}$ der Zustände $\psi_{\underline{k}}^0(\underline{r})$ genügen den Fermionen-Antikommutatorregeln.

$U_0^P(\underline{r})$ ist das durch die Peierls-Überstruktur verursachte zusätzliche Elektron-Ion-Potential. Es führt zu einer Energielücke an der Fermikante und ändert dort den Charakter der elektronischen Wellenfunktion.

$$U_0^P(\underline{r}) = -i\delta c \sum_{\underline{q}} q_z u_{\underline{q}} e^{i\underline{q}\underline{r}} \sum_j e^{-i\underline{q}\underline{R}_j^0} \sin(2k_F R_{zj}^0 + \phi_{R_{1j}^0})$$

$$= e^{i2k_F z} \sum_{R_{1j}} e^{i\phi_{R_{1j}}} \Delta(\underline{r}_{\perp} - R_{1j}) + C.C.$$
(3.8)

mit

$$\Delta(\underline{r}_{\perp}) = -\frac{\delta c N_{\parallel}}{2} 2k_F \sum_{\underline{q}_{\perp}} u(\underline{q}_{\perp}, 2k_F) e^{i\underline{q}_{\perp}(\underline{r}_{\perp} - R_{1j})} \quad +)$$

(\underline{q}_{\perp} steht für den Vektor (q_x, q_y) , ebenso \underline{r}_{\perp} , R_{1j} usw.; N_{\parallel} ist die Zahl der Gitteratome pro Kette.)

⁺) Da $u_{-\underline{q}} = u_{\underline{q}}$ gilt (wegen $u(\underline{r}) = u(-\underline{r})$), ist Δ reell.

Beim Übergang zur zweiten Zeile haben wir Terme mit $q_z = n \cdot \frac{2\pi}{c} \pm 2k_F$ ($n = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$) weggelassen. Diese Komponenten des ÜS-Potentials führen an den Stellen $q_z = 2k_F + n\tau_z$ zu Energielücken. Da diese Gaps jedoch nicht an der Fermifläche liegen (Inkommensurabilität von $2k_F$ und τ_z), sind sie von geringem Einfluß auf die Polarisierbarkeit des Elektronengases und damit die Phononendispersion.

Auch $U_o^P(\underline{r})$ wird noch durch die Coulombkräfte der Elektronen untereinander modifiziert. Mit der vereinfachenden Annahme

$$L(r_{\perp}-R_{\perp}) \Delta(r_{\perp}-\bar{R}_{\perp}) = L(r_{\perp}-R_{\perp}) \Delta(r_{\perp}-R_{\perp}) \delta_{R_{\perp}, \bar{R}_{\perp}} = \Delta \cdot L(r_{\perp}-R_{\perp}) \delta_{R_{\perp}, \bar{R}_{\perp}}$$

(d.h., das Überstrukturpotential einer Kette soll Elektronen anderer Ketten nicht beeinflussen, über den Lokalisationsbereich eines Elektrons auf dieser Kette jedoch nahezu konstant sein,) erhalten wir zu

$$H(\underline{r}, \underline{p}) = -\frac{\nabla^2}{2m} + U_o^J(x, y) + U_o^P(\underline{r})$$

die Eigenfunktionen

$$\psi_{\underline{k}}(\underline{r}) = \langle \underline{r} | \underline{k} \rangle_{\text{Peierls}} = \sqrt{\frac{1}{N_{\perp}}} \sum_{R_{\perp}} \psi_{k_z}(z, R_{\perp}) e^{ik_{\perp} R_{\perp} L(|r_{\perp}-R_{\perp}|)} \quad (3.9)$$

mit Energieeigenwerten E_{k_z} .

$\psi_{k_z}(z, R_{\perp})$ und E_{k_z} sind definiert durch

$$\left(-\frac{1}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \Delta e^{i\phi_{R_{\perp}}} e^{i2k_F z} + \text{C.C.} \right) \psi_{k_z}(z, R_{\perp}) = E_{k_z} \psi_{k_z}(z, R_{\perp}) \quad (3.10)$$

Bezüglich der Schreibweise $\langle \underline{r} | \underline{k} \rangle_p$ gilt das auf Seite 10 gesagte.

Auch hier unterdrücken wir die Spinindices.

Die Eielektronenfunktionen $|\underline{k}\rangle_o$, die im unverzerrten System ($\Delta = 0$) ihre Gültigkeit hatten, wechselwirken also über die $2k_F$ -periodische Peierls-Überstruktur gemäß $|k_x, k_y, k_z\rangle_o \iff |k_x, k_y, k_z \pm 2k_F\rangle_o$ miteinander. Solche Prozesse sind in Abb. 6a dargestellt.

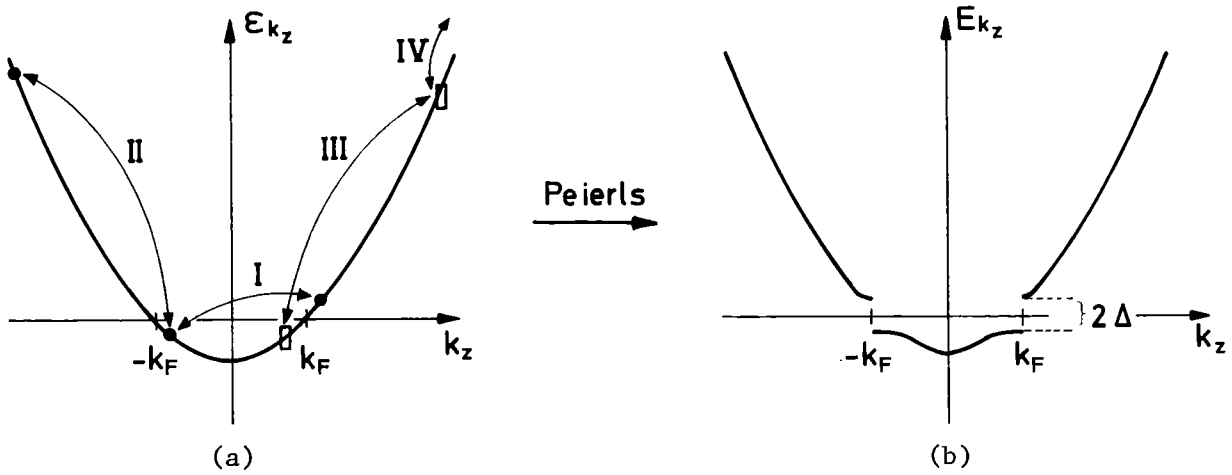


Abb. 6 a) Wechselwirkung freier Elektronen durch die Peierls-Überstruktur.
b) Daraus resultierende neue Dispersion.

Da Δ klein im Vergleich zur Fermienergie E_F ist (KCP: $\Delta \approx 100$ meV, $E_F = 3.25$ eV /18/), führt diese Störung nur dann zu wesentlichen Korrekturen in elektronischer Wellenfunktion und Dispersion, falls die Wechselwirkungspartner energetisch benachbart sind. Deshalb beschränken wir uns für $|k_z| < 2k_F$ auf die Wechselwirkung $k_z \rightleftharpoons k_z - 2k_F \text{ sign } k_z$ und lassen für $|k_z| > 2k_F$ die Störung ganz außer acht. (Also nur Prozesse vom Typ I in Abb. 6a werden berücksichtigt.)

Um die Wirkung dieser Streuung zu ermitteln, schreiben wir die Eigenwertgleichungen in Matrixform auf der Basis ebener Wellen mit k_z und $k_z - G_{k_z}$ ($G_{k_z} = 2k_F \text{ sign } k_z$) und erhalten für die Zustände $|\underline{k}\rangle$ mit $|k_z| < 2k_F$

$$\begin{pmatrix} \epsilon_{k_z} & \Delta e^{i\phi_{k_z}} \\ \Delta e^{-i\phi_{k_z}} & \epsilon_{k_z - G_{k_z}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = E_{k_z} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

mit

$$\phi_{k_z} = \phi_{R_1} \text{ sign } k_z$$

Diagonalisierung der Matrix liefert die neuen Eigenzustände durch die folgende Transformation

$$\begin{pmatrix} \psi_{k_z}(z, \phi_{R_\perp}) \\ \psi_{k_z - G_{k_z}}(z, \phi_{R_\perp}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \alpha_{k_z} & -i\phi_{k_z} \sin \alpha_{k_z} \\ -e^{i\phi_{k_z}} \sin \alpha_{k_z} & \cos \alpha_{k_z} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ik_z z} \\ e^{i(k_z - G_{k_z})z} \end{pmatrix} \quad (3.11a)$$

mit

$$\frac{\cos^2 \alpha_{k_z}}{\sin^2 \alpha_{k_z}} = \frac{1}{2} \left(1 \pm \frac{\eta_{k_z}}{\sqrt{\eta_{k_z}^2 + \Delta^2}} \right) ; \quad \eta_{k_z} = v_F \left| |k_z| - k_F \right| \quad (3.11b)$$

Für $|k_z| > 2k_F$ gilt nach wie vor $\psi_{k_z} = e^{ik_z z}$.

Wir verwenden im folgenden die Bezeichnung

$$\psi_{k_z}(z, \phi_{R_\perp}) = A_{k_z} e^{ik_z z} + B_{k_z} e^{-i\phi_{k_z}} e^{i(k_z - G_{k_z})z} \quad (3.12a)$$

wobei

$$A_{k_z} = \begin{cases} \cos \alpha_{k_z} & \text{für } |k_z| < 2k_F \\ 1 & \text{für } |k_z| > 2k_F \end{cases} \quad B_{k_z} = \begin{cases} \text{sign}(|k_z| - k_F) \sin \alpha_{k_z} & \text{für } |k_z| < 2k_F \\ 0 & \text{für } |k_z| > 2k_F \end{cases} \quad (3.12b)$$

gilt. Mit Glg. (3.9) erhalten wir also die Wellenfunktionen⁺⁾

$$\underline{\psi}_{k_z}(\underline{r}) = \sqrt{\frac{1}{N_L}} \sum_{R_\perp} \{ A_{k_z} e^{ik_z z} + B_{k_z} e^{-i\phi_{k_z}} e^{i(k_z - G_{k_z})z} \} e^{ik_\perp R_\perp} L(r_\perp - R_\perp) \quad (3.13)$$

Die zugehörigen Energieeigenwerte sind

$$E_{k_z} = \frac{\epsilon_{k_z} + \epsilon_{k_z - G_{k_z}}}{2} + \text{sign}(|k_z| - k_F) \sqrt{\left(\frac{\epsilon_{k_z} - \epsilon_{k_z - G_{k_z}}}{2} \right)^2 + \Delta^2} \quad |k_z| > 2k_F \quad (3.14)$$

$$E_{k_z} = \epsilon_{k_z} \quad |k_z| < 2k_F$$

Aus den freien Elektronen sind durch den Peierls-Übergang nahezu freie Elektronen mit einer Energielücke 2Δ an der Fermikante geworden.

⁺⁾ Diese Funktionen bilden - unter der Annahme vernachlässigbaren Überlapps - ein vollständiges Orthonormalsystem.

In 2. Quantisierung ist

$$\begin{aligned}
 H &= \sum_{\underline{k}, \perp} \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + U_o^J(x, y) + U_o^P(\underline{r}) \right) | \perp \rangle c_{\underline{k}}^+ c_{\perp} \\
 &= \sum_{\underline{k}} E_{k_z} c_{\underline{k}}^+ c_{\underline{k}}
 \end{aligned}
 \tag{3.15}$$

(in der beschriebenen Näherung).

Die Fermioperatoren $c_{\underline{k}}^+$, $c_{\underline{k}}$, die die Peierlszustände erzeugen, bzw. vernichten, lassen sich, falls die Phasen der Überstruktur auf verschiedenen Ketten durch $\phi_{R_{\perp}} = Q_x R_x + Q_y R_y = Q_{\perp} \cdot R_{\perp}$ definiert sind, durch die Transformationsgleichung

$$\begin{pmatrix} c_{\underline{k}} \\ c_{k_{\perp}-Q_{\perp}, k_z - G_{k_z}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \alpha_{k_z} & \sin \alpha_{k_z} \\ -\sin \alpha_{k_z} & \cos \alpha_{k_z} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{\underline{k}} \\ a_{k_{\perp}-Q_{\perp}, k_z - G_{k_z}} \end{pmatrix}
 \tag{3.16}$$

für $|k_z| < 2k_F$ und $c_{\underline{k}} = a_{\underline{k}}$ für $|k_z| > 2k_F$ gewinnen.

Im Fall statistischer Anordnung der Phasen, d.h. ohne definiertes Q_{\perp} , ist dies nicht möglich.

Mit den $c_{\underline{k}}^+$, $c_{\underline{k}}$ definieren wir die Elektron-Greenfunktion (Elektronen-Propagator):

$$G(\underline{k}, \omega) = \int dt e^{i\omega t} (-i) \langle 0 | T \{ c_{\underline{k}}(t) c_{\underline{k}}^+(0) \} | 0 \rangle = \frac{1}{\omega - E_{k_z} + i\delta_{k_z}}
 \tag{3.17}$$

$|0\rangle$ ist der Grundzustand des wechselwirkungsfreien Peierlssystem, T der Wick'sche Zeitordnungsoperator, $\delta_{k_z} = (\text{sign}(|k_z| - k_F) \cdot \text{Infinitesimale})/6$.

Mit $H = \sum_{\underline{k}} E_{k_z} c_{\underline{k}}^+ c_{\underline{k}}$ haben wir das Elektronensystem eines Peierlssystem mit verschmiertem Ladungshintergrund beschrieben. Damit bleibt aus dem Elektron-Ruhepotential lediglich noch $U_o^U(\underline{r})$, d.h., die Gitterstruktur des Ladungshintergrunds, zu berücksichtigen. Dies werden wir im Zusammenhang mit der Elektron-Phonon-Kopplung im Rahmen einer Störungsrechnung tun. An dieser Stelle notieren wir nur noch $U_o^U(\underline{r})$ in 2. Quantisierung.

$$U_o^U = N \sum_{\underline{k}, \perp} \sum_{\underline{r}} \frac{1}{\tau} \int_0^{\tau} dt e^{i\underline{r} \cdot \underline{k}} | \perp \rangle c_{\underline{k}}^+ c_{\perp}
 \tag{3.18}$$

(weitere "Verarbeitung" S. 23).

4. Unrenormierte Gitterschwingungen

Die quantisierten Gitterschwingungen, deren Dispersion durch die Wechselwirkung der positiven Ionenrümpfe untereinander und mit dem nicht polarisierten Elektronensystem zustande kommt, bilden unsere unrenormierten Phononen. (Den Einfluß der Polarisierbarkeit des Elektronengases (Teilchen-Loch-Paare mit Impuls $\underline{q} \neq 0$) berücksichtigen wir störungstheoretisch in der Elektron-Phonon-Kopplung.) Für die uns interessierenden longitudinalen Phononen mit Impulsvektor parallel oder in einem engen Kegel um die Kettenrichtung ($q_x^2 + q_y^2 \ll q_z^2$) setzen wir die unrenormierte Frequenz gleich der Ionenplasmafrequenz Ω .

Damit ist der Phonon-Hamiltonoperator in zweiter Quantisierung

$$H^{\text{Ph}} = \sum_{\underline{q}} \Omega b_{\underline{q}}^{\dagger} b_{\underline{q}} \quad (4.1)$$

Die Phonon-Erzeuger bzw. -Vernichter $b_{\underline{q}}^{\dagger}$, $b_{\underline{q}}$ erfüllen die Bose-Kommutatorregeln. Mit den Phononfeldamplituden

$$\Phi_{\underline{q}} = \frac{b_{\underline{q}} + b_{-\underline{q}}^{\dagger}}{\sqrt{2\Omega}} \quad (4.2)$$

läßt sich die Auslenkung $\delta R_{\underline{j}}$ des j -ten Gitterbausteins schreiben als /6/ ($\hbar = 1$):

$$\delta R_{\underline{j}} = \sqrt{\frac{1}{NM}} \sum_{\underline{q}} \underline{\varepsilon}_{\underline{q}} e^{i\underline{q} R_{\underline{j}}^0} \Phi_{\underline{q}} \quad (4.3)$$

Die Polarisationsvektoren $\underline{\varepsilon}_{\underline{q}}$ sind im uns interessierenden Zweig Einheitsvektoren parallel zur z -Richtung, wir betrachten also nur Auslenkungen parallel zu den Ketten. $R_{\underline{j}}^0$ sind die Ionenruhelagen ohne Überstruktur, d.h. wir vernachlässigen den direkten Effekt der Überstruktur auf das Phononensystem. Diese Korrekturen sind relativ von der gleichen Größenordnung wie die Überstruktur ($\sim 1^0/\infty$ für KCP) /19/ und deshalb vernachlässigbar gegenüber den Veränderungen der Phononendispersion, die indirekt durch die in der Peierlsphase veränderte Elektron-Phonon-Wechselwirkung zustande kommen.

Der freie Phononenpropagator ist definiert als /6/

$$d_0(\underline{q}, \omega) = \int dt e^{i\omega t} (-i) \langle 0 | T \{ \Phi_{\underline{q}}(t) \Phi_{\underline{q}}^{\dagger}(0) \} | 0 \rangle = \frac{1}{\omega^2 - \Omega^2 + i\delta} \quad (4.4)$$

Den exakten Phononenpropagator definieren wir als

$$d(\underline{q}, \underline{q}', \omega) = \int dt e^{i\omega t} (-i) \langle 0 | T \{ \Phi_{\underline{q}'}(t) \Phi_{\underline{q}}^{\dagger}(0) \} | 0 \rangle_{\text{ex}}$$

$|0\rangle_{\text{ex}}$ ist der Grundzustand des wechselwirkenden Peierlssystems, δ eine positive Infinitesimale. Im Gegensatz zu $d_p(\underline{q}, \omega)$ ist $d(\underline{q}, \underline{q}', \omega)$ nicht diagonal in $\underline{q}, \underline{q}'$ (s. Abschnitt 7).

5. Elektron-Phonon-Kopplung

Die Elektron-Phonon-Kopplung beschreibt die Wechselwirkung zwischen Gitterschwingungen und Anregungen des Elektronensystems, also zwischen Phononen und Teilchen-Loch-Paaren.

Wir entwickeln das Elektron-Ion-Potential nach den Auslenkungen $\delta \underline{R}$:

$$\begin{aligned}
 U(\underline{r}) &= \sum_{\underline{R}_j} u(\underline{r} - (\underline{R}_j + \delta \underline{R}_j)) \\
 &= U_0(\underline{r}) + \sum_{\underline{R}_j} \delta \underline{R}_j \cdot \nabla u(\underline{r} - \underline{R}_j) \Big|_{\underline{R}_j^0} + \frac{1}{2} (\delta \underline{R}_j \cdot \nabla)^2 u(\underline{r} - \underline{R}_j) \Big|_{\underline{R}_j^0} + O(\delta \underline{R}_j^3) \\
 &= U_0(\underline{r}) + U_1(\underline{r}) + U_2(\underline{r}) + O(\delta R^3)
 \end{aligned} \tag{5.1}$$

$U_0(\underline{r})$, das Potential der Ionen in den Gleichgewichtslagen, steckt bis auf $U_0^U(\underline{r})$ bereits im Hamiltonoperator für die Peierls-Elektronen (Abschnitt 3). $U_1(\underline{r})$ beschreibt die Wechselwirkung eines Teilchen-Loch-Paares mit einem Phonon, $U_2(\underline{r})$ mit 2 Phononen. Wir werden Teile von $U_2(\underline{r})$ in Verbindung mit $U_0(\underline{r})$ zur korrekten Beschreibung von Umklapp-Prozessen benötigen.

Mit Glg. (4.3) wird $U_1(\underline{r})$:

$$\begin{aligned}
 U_1(\underline{r}) &= \sum_{\underline{R}_j} \sqrt{\frac{1}{NM}} \sum_{\underline{q}} e^{i \underline{q} \cdot \underline{R}_j} \underline{\epsilon}_{\underline{q}} \cdot \sum_{\underline{Q}} i \underline{Q} u_{\underline{Q}} e^{i \underline{Q} \cdot (\underline{r} - \underline{R}_j^0)} \Phi_{\underline{q}} \\
 &= \sqrt{\frac{N}{M}} \sum_{\underline{q}, \underline{\tau}} i (\underline{\epsilon}_{\underline{q}} \cdot (\underline{q} + \underline{\tau})) u_{\underline{q} + \underline{\tau}} e^{i (\underline{q} + \underline{\tau}) \cdot \underline{r}} \Phi_{\underline{q}}
 \end{aligned} \tag{5.2}$$

Es läßt sich in 2. Quantisierung schreiben als

$$U_1 = \sum_{\underline{k}, \underline{1}} \sum_{\underline{q}, \underline{\tau}_z} g_{\underline{k}, \underline{1}}^{\underline{q} + \underline{\tau}_z} \Phi_{\underline{q}} c_{\underline{k}}^+ c_{\underline{1}} \tag{5.3}$$

mit

$$g_{\underline{k}, \underline{1}}^{\underline{q} + \underline{\tau}_z} = i \sqrt{\frac{N}{M}} \sum_{\underline{\tau}_z} \underline{\epsilon}_{\underline{q}} \cdot (\underline{q} + \underline{\tau}_z) u_{\underline{q} + \underline{\tau}_z} \langle \underline{k} | e^{i (\underline{q} + \underline{\tau}_z) \cdot \underline{r}} | \underline{1} \rangle \tag{5.4}$$

$$(\underline{\epsilon}_{\underline{q} + \underline{\tau}_z} \equiv \underline{\epsilon}_{\underline{q}}, \Phi_{\underline{q}} \equiv \Phi_{\underline{q} + \underline{\tau}_z}, \underline{\tau}_z = (0, 0, \tau_z))$$

Die durch U_1 beschriebenen Elektron-Phonon-Streuprozesse lassen sich durch ein Feynman-Diagramm verdeutlichen:



Am Elektron-Phonon-Vertex (\bullet) wird ein Elektron aus dem Zustand \underline{l} (\rightarrow) unter Vernichtung eines Phonons mit Wellenvektor \underline{q} (\sim) in den Zustand \underline{k} gestreut. Die Matrixelemente des Typs $C_{\underline{k}\underline{l}}^{\underline{q}} = \langle \underline{k} | e^{i\underline{q}\underline{r}} | \underline{l} \rangle$

bestimmen dabei die Auswahlregeln für \underline{k} bei vorgegebenem \underline{l} und \underline{q} . Aufgrund der Gitterstruktur des Ladungshintergrunds erhalten wir Umklapp-Prozesse, die durch $C_{\underline{k}\underline{l}}^{\underline{q}+\underline{\tau}}$ beschrieben werden.

$C_{\underline{k}\underline{l}}^{\underline{q}}$ wird auch im folgenden Abschnitt über die Elektron-Elektron-Wechselwirkung eine wichtige Rolle spielen. Wir berechnen es nun für ein System von Peierls-Elektronen. (Für freie Elektronen wäre $C_{\underline{k}\underline{l}}^{\underline{q}} = \delta_{\underline{k}, \underline{l}+\underline{q}}$.)

$$C_{\underline{k}\underline{l}}^{\underline{q}} \equiv \langle \underline{k} | e^{i\underline{q}\underline{r}} | \underline{l} \rangle \quad (5.5)$$

$$= \frac{1}{N_{\perp}} \sum_{\underline{R}_{\perp}} \sum_{\tilde{\underline{R}}_{\perp}} e^{-i\underline{k}_{\perp}\underline{R}_{\perp}} e^{i\underline{l}_{\perp}\tilde{\underline{R}}_{\perp}} \cdot \int d^3r \psi_{\underline{k}_z}^*(z, \phi_{\underline{R}_{\perp}}) \psi_{\underline{l}_z}(z, \phi_{\tilde{\underline{R}}_{\perp}}) L^*(|\underline{r}_{\perp}-\underline{R}_{\perp}|) L(|\underline{r}_{\perp}-\tilde{\underline{R}}_{\perp}|) e^{i\underline{q}\underline{r}}$$

$$= \frac{1}{N_{\perp}} \cdot \int dx dy L^2(|(x,y)|) \cdot \sum_{\underline{R}_{\perp}} e^{i(1_{\perp}+q_{\perp}-k_{\perp})\underline{R}_{\perp}} \cdot \int dz \psi_{\underline{k}_z}^*(z, \phi_{\underline{R}_{\perp}}) e^{i\underline{q}_z z} \psi_{\underline{l}_z}(z, \phi_{\underline{R}_{\perp}})$$

Wir haben dabei von $L(|\underline{r}_{\perp}-\underline{R}_{\perp}|) L(|\underline{r}_{\perp}-\tilde{\underline{R}}_{\perp}|) = L^2(|\underline{r}_{\perp}-\underline{R}_{\perp}|) \delta_{\underline{R}_{\perp}, \tilde{\underline{R}}_{\perp}}$ Gebrauch gemacht.

Wegen

$$\psi_{\underline{k}_z}(z, \phi) = \psi_{\underline{k}_z}\left(z + \frac{\phi}{2k_F}, 0\right) e^{-i \frac{k_z}{2k_F} \phi}$$

gilt weiter

$$\int dz \psi_{\underline{k}_z}^*(z, \phi) e^{i\underline{q}_z z} \psi_{\underline{l}_z}(z, \phi) = e^{i \frac{k_z - q_z - l_z}{2k_F} \phi} \cdot \int dz \psi_{\underline{k}_z}^*(z, 0) e^{i\underline{q}_z z} \psi_{\underline{l}_z}(z, 0)$$

Damit können wir $C_{\underline{k}\underline{l}}^{\underline{q}}$ mit den drei Größen

$$\Lambda_{\underline{q}\underline{l}} = \int dx dy L(|(x,y)|) e^{i(\underline{q}_x x + \underline{q}_y y)} \quad (5.6a)$$

$$M_{\underline{k}_z, \underline{l}_z}^{\underline{q}} = \int dz \psi_{\underline{k}_z}^*(z, 0) e^{i\underline{q}_z z} \psi_{\underline{l}_z}(z, 0) \quad (5.6b)$$

$$H(\underline{l}+\underline{q}-\underline{k}) = \frac{1}{N_{\perp}} \sum_{\underline{R}_{\perp}} e^{i(1_{\perp}+q_{\perp}-k_{\perp})\underline{R}_{\perp}} e^{i \frac{k_z - q_z - l_z}{2k_F} \phi_{\underline{R}_{\perp}}} \quad (5.6c)$$

schreiben als

$$C_{\underline{k}\underline{l}}^q \equiv \langle \underline{k} | e^{\frac{iqr}{\hbar}} | \underline{l} \rangle = \Lambda_{q\underline{l}} M_{\underline{k}_z, \underline{l}_z}^{q_z} H(1+q-\underline{k}) \quad (5.7)$$

$\Lambda_{q\underline{l}}$, die Fouriertransformierte der elektronischen Lokalisationsfunktion $L(|x, y|)$, lässt sich für das Beispiel Glg. (3.4) berechnen zu

$$\Lambda_{q\underline{l}} = \left(1 + \frac{\lambda^2 q_{\perp}^2}{4}\right)^{-3/2}$$

Wir betrachten den zweiten Faktor. Er bestimmt die Auswahlregeln für die z-Komponente der Impulse. (Hätten wir es mit ebenen Wellen zu tun, wäre $M_{\underline{k}_z, \underline{l}_z}^{q_z} = \delta_{\underline{k}_z, \underline{l}_z + q_z}$ und damit $C_{\underline{k}\underline{l}}^q = \delta_{\underline{k}, \underline{l} + q + \tau_{\perp}} \Lambda_{q\underline{l}}$). Hier aber ist (Glg. (3.12))

$$\begin{aligned} M_{\underline{k}, \underline{l}}^q &= \int dz \left[A_{\underline{k}} e^{-ikz} + B_{\underline{k}} e^{-i(k-G_{\underline{k}})z} \right] e^{iqz} \left[A_{\underline{l}} e^{ilz} + B_{\underline{l}} e^{i(1-G_{\underline{l}})z} \right] \\ &= A_{\underline{k}} A_{\underline{l}} \delta_{\underline{k}, \underline{l} + q} + B_{\underline{k}} A_{\underline{l}} \{ \theta(k) \delta_{\underline{k}, \underline{l} + q + 2k_F} + \theta(-k) \delta_{\underline{k}, \underline{l} + q - 2k_F} \} \\ &\quad + A_{\underline{k}} B_{\underline{l}} \left[\theta(1) \delta_{\underline{k}, \underline{l} + q - 2k_F} + \theta(-1) \delta_{\underline{k}, \underline{l} + q + 2k_F} \right] \\ &\quad + B_{\underline{k}} B_{\underline{l}} \left[\theta(k) \theta(1) + \theta(-k) \theta(-1) \right] \delta_{\underline{k}, \underline{l} + q} \\ &\quad + B_{\underline{k}} B_{\underline{l}} \left[\theta(1) \theta(-k) \delta_{\underline{k}, \underline{l} + q - 4k_F} + \theta(k) \theta(-1) \delta_{\underline{k}, \underline{l} + q + 4k_F} \right] \\ &= \sum_{\mu=-2}^2 \zeta_{\mu}(1, 1+q) \delta_{\underline{k}, \underline{l} + q + \mu 2k_F} \end{aligned} \quad (5.8)$$

Die Funktion $\theta(x)$ ist definiert als

$$\theta(x) = \begin{cases} 1 & x > 0 \\ 0 & x < 0 \end{cases}$$

Die ζ_{μ} sind gegeben durch

$$\begin{aligned} \zeta_0(1, 1+q) &= A_{1+q} A_1 + B_{1+q} B_1 \left[\theta(1+q) \theta(1) + \theta(-(1+q)) \theta(-1) \right] \\ \zeta_{-1}(1, 1+q) &= B_{1+q-2k_F} A_1 \theta(-(1+q-2k_F)) + A_{1+q-2k_F} B_1 \theta(1) \\ \zeta_1(1, 1+q) &= B_{1+q+2k_F} A_1 \theta(1+q+2k_F) + A_{1+q+2k_F} B_1 \theta(-1) \\ \zeta_{-2}(1, 1+q) &= B_{1+q-4k_F} B_1 \theta(1) \theta(-(1+q-4k_F)) \\ \zeta_2(1, 1+q) &= B_{1+q+4k_F} B_1 \theta(1+q+4k_F) \theta(-1) \end{aligned} \quad (5.9)$$

Neben den normalen Streuprozessen mit $k_z = l_z + q_z$ sind aufgrund der veränderten Symmetrie jetzt auch anomale Prozesse $k_z = l_z + q_z + \mu 2k_F$, $\mu = 0, \pm 1, \pm 2$, erlaubt. Man kann die anomalen Prozesse ($k_z = l_z + q_z \pm n 2k_F$, $n = 1, 2$) als Umklapp-Prozesse bezüglich der Überstruktur auffassen. Im Gegensatz zu den "üblichen" Umklapp-Prozessen bezüglich der Grundstruktur haben höhere Ordnungen jedoch zunehmend geringeres Gewicht.

Die Auswahlregeln für die senkrechten Impulskomponenten sind durch den Faktor

$$H(\underline{l} + \underline{q} - \underline{k}) = \frac{1}{N_{\perp}} \sum_{R_{\perp}} e^{i(l_{\perp} + q_{\perp} - k_{\perp})R_{\perp}} e^{i \frac{(k_z - l_z - q_z)}{2k_F} \phi_{R_{\perp}}} \quad \text{gegeben.}$$

Für die normalen Prozesse $k_z = l_z + q_z$ gilt $k_{\perp} = l_{\perp} + q_{\perp}$ (modulo τ_{\perp}). Gilt $\phi_{R_{\perp}} = Q_{\perp} \cdot R_{\perp}$, d.h. hat die Überstruktur eine definierte transversale Wellenzahl Q_{\perp} :

$$\underline{R}^P = (0, 0, \delta c \sin(2k_F R_z^O + Q_x R_x + Q_y R_y))$$

so wird auch Q_{\perp} bei anomalen Streuprozessen übertragen:

$$\begin{aligned} \phi_{R_{\perp}} &= Q_{\perp} \cdot R_{\perp} \\ H(\underline{l} + \underline{q} - \underline{k}) &= \delta_{k_{\perp}, l_{\perp} + q_{\perp}} + \frac{k_z - (l_z + q_z)}{2k_F} Q_{\perp} \end{aligned}$$

Es gilt also insgesamt $\underline{k} = \underline{l} + \underline{q} + \mu(Q_x, Q_y, 2k_F)$. Ist ein solches Q_{\perp} nicht definiert, d.h. sind die Phasen statistisch ungeordnet, muß eine Konfigurationsmittelung durchgeführt werden. Darauf gehen wir in Abschnitt 11 näher ein.

Die bisherigen Überlegungen führen zum Zwischenergebnis

$$\underline{g}_{\underline{k}\underline{l}}^{q+\tau_z} = i \sqrt{\frac{N}{M}} \sum_{\tau_{\perp}} \underline{\varepsilon}_{\underline{q}} \cdot (\underline{q} + \tau) \Lambda_{q_{\perp} + \tau_{\perp}} u_{\underline{q} + \tau} \cdot H(\underline{l} + \underline{q} + \tau - \underline{k}) M_{k_z, l_z}^{q_z + \tau_z} \quad (5.10)$$

Über das Elektron-Ion-Potential $u_{\underline{q}}$ haben wir bisher noch nichts ausgesagt. Wir setzen es in Form eines modifizierten Ashcroft-Potentials mit Radius R_c an:

$$\underline{u}_{\underline{q}} = \frac{4\pi Z e^2}{\varepsilon_{\perp}(q_x^2 + q_y^2) + \varepsilon_{\parallel} q_z^2} \cos q R_c \quad (5.11)$$

Z ist die Valenz des Ions. ε_{\parallel} symbolisiert den Anteil der Dielektrizitätskonstante (parallel zur Kettenrichtung), den wir nicht explizit, wie die Beiträge der Polarisierbarkeit des Elektronengases etwa, berücksichtigen.

Er kommt z.B. durch die Polarisation gebundener Elektronen oder anderer Gitterbausteine zustande. Aus Messungen der optischen Dielektrizitätsfunktion $\epsilon_{\parallel}(\omega)$ für Frequenzen ω größer als die Elektronenplasmafrequenz, jedoch unterhalb atomarer Resonanzfrequenzen, resultiert für KCP $\epsilon_{\parallel} \approx 2.1 / 18 /$. ϵ_{\perp} ist die für die Senkrechte zur Kettenrichtung analoge Größe, für KCP ist $\epsilon_{\perp} \approx 4 / 20 /$. ϵ_{\perp} ist weitgehend frequenzunabhängig.

Mit der Ionenplasmafrequenz

$$\Omega^2 = \frac{4\pi N Z^2 e^2}{\epsilon_{\parallel} M}$$

erhalten wir aus Glg. (5.10)

$$g_{\underline{k}\underline{l}}^{\underline{q}+\underline{\tau}_z} = i \Omega \sqrt{\epsilon_{\parallel}} \sum_{\underline{\tau}_\perp} (\epsilon_{\underline{q}} \cdot (\underline{q}+\underline{\tau})) \cdot \Lambda_{\underline{q}_\perp+\underline{\tau}_\perp} \cdot \frac{\sqrt{4\pi e^2} \cos(\underline{q}+\underline{\tau}) R_c}{\epsilon_{\perp}(\underline{q}_\perp+\underline{\tau}_\perp)^2 + \epsilon_{\parallel}(\underline{q}_z+\underline{\tau}_z)^2} \cdot H(\underline{1}+\underline{q}+\underline{\tau}-\underline{k}) M_{\underline{k}_z, \underline{l}_z}^{\underline{q}_z+\underline{\tau}_z}$$

Mit $\epsilon_{\underline{q}} \parallel$ Kettenrichtung und mit dem modifizierten Elektron-Ion-Potential

$$\tilde{u}_{\underline{q}_\perp, \underline{q}_z+\underline{\tau}_z} = \sum_{\underline{\tau}_\perp} \Lambda_{\underline{q}_\perp+\underline{\tau}_\perp} \frac{\sqrt{4\pi e^2} \cos(\underline{q}+\underline{\tau}) R_c}{\epsilon_{\perp}(\underline{q}_\perp+\underline{\tau}_\perp)^2 + \epsilon_{\parallel}(\underline{q}_z+\underline{\tau}_z)^2} \quad (5.12)$$

können wir $g_{\underline{k}\underline{l}}^{\underline{q}+\underline{\tau}_z}$ kompakter darstellen

$$\begin{aligned} g_{\underline{k}\underline{l}}^{\underline{q}+\underline{\tau}_z} &= i \Omega \sqrt{\epsilon_{\parallel}} (\underline{q}_z+\underline{\tau}_z) \tilde{u}_{\underline{q}_\perp, \underline{q}_z+\underline{\tau}_z} \cdot H(\underline{1}+\underline{q}+\underline{\tau}_z-\underline{k}) M_{\underline{k}_z, \underline{l}_z}^{\underline{q}_z+\underline{\tau}_z} \\ &= g_{\underline{k}\underline{l}}^{\underline{q}+\underline{\tau}_z} \cdot H(\underline{1}+\underline{q}+\underline{\tau}_z-\underline{k}) \cdot M_{\underline{k}_z, \underline{l}_z}^{\underline{q}_z+\underline{\tau}_z} \end{aligned} \quad (5.13a)$$

mit dem nur vom Impulsübertrag $\underline{q}+\underline{\tau}_z$ abhängigen

$$g_{\underline{k}\underline{l}}^{\underline{q}+\underline{\tau}_z} = i \Omega \sqrt{\epsilon_{\parallel}} (\underline{q}_z+\underline{\tau}_z) \tilde{u}_{\underline{q}_\perp, \underline{q}_z+\underline{\tau}_z} \quad (5.13b)$$

Für den in den folgenden Abschnitten untersuchten Fall phasengleicher Ketten ($\phi_{R_\perp} \equiv 0$) gilt

$$U_1^0 = \sum_{\underline{\tau}_z} \sum_{\underline{k}, \underline{q}} g_{\underline{k}\underline{l}}^{\underline{q}+\underline{\tau}_z} \Phi_{\underline{q}} \sum_{\mu=-2}^2 \zeta_{\mu}(\underline{k}_z, \underline{k}_z+\underline{q}_z+\underline{\tau}_z) c_{\underline{k}_\perp+\underline{q}_\perp, \underline{k}_z+(\underline{q}_z+\underline{\tau}_z)+\mu 2k_F}^+ c_{\underline{k}} \quad (5.14)$$

Wir kommen nun zum 2-Phononenterm $U_2(\underline{r})$ aus Glg. (5.1):

$$\begin{aligned}
 U_2(\underline{r}) &= \sum_{\underline{R}_j^0} \frac{1}{2NM} \left(\sum_{\underline{q}} \phi_{\underline{q}} \varepsilon_{\underline{q}} e^{i\underline{q}\underline{R}_j^0} \cdot \nabla \right)^2 \sum_{\underline{Q}} u_{\underline{Q}} e^{i\underline{Q}(\underline{r}-\underline{R}_j^0)} \\
 &= \sum_{\underline{R}_j^0} \frac{1}{2NM} \sum_{\underline{Q}} \sum_{\underline{q}\tilde{q}} i(\underline{\varepsilon}_{\underline{q}} \cdot \underline{Q}) i(\underline{\varepsilon}_{\tilde{q}} \cdot \underline{Q}) e^{i(\underline{q}+\tilde{q})\underline{R}_j^0} u_{\underline{Q}} e^{i\underline{Q}(\underline{r}-\underline{R}_j^0)} \phi_{\underline{q}} \phi_{\tilde{q}} \\
 &= -\frac{1}{2M} \sum_{\underline{r}} \sum_{\underline{q}\tilde{q}} (\underline{\varepsilon}_{\underline{q}} \cdot (\underline{q}+\tilde{q}+\underline{r})) (\underline{\varepsilon}_{\tilde{q}} \cdot (\underline{q}+\tilde{q}+\underline{r})) u_{\underline{q}+\tilde{q}+\underline{r}} e^{i(\underline{q}+\tilde{q}+\underline{r})\underline{r}} \phi_{\underline{q}} \phi_{\tilde{q}} \\
 &= -\frac{1}{2M} \sum_{\underline{r}} \sum_{\underline{q}\underline{Q}} (\underline{\varepsilon}_{\underline{q}} \cdot (\underline{Q}+\underline{r})) (\underline{\varepsilon}_{\underline{q}-\underline{Q}}^* \cdot (\underline{Q}+\underline{r})) u_{\underline{Q}+\underline{r}} e^{i(\underline{Q}+\underline{r})\underline{r}} \phi_{\underline{q}} \phi_{\underline{q}-\underline{Q}}^+
 \end{aligned}$$

wobei in der letzten Zeile $\underline{Q} = \underline{q}+\tilde{q}$ und $\underline{\varepsilon}_{-\underline{q}} = \underline{\varepsilon}_{\underline{q}}^*$, $\phi_{-\underline{q}} = \phi_{\underline{q}}^+$ verwendet wurde.

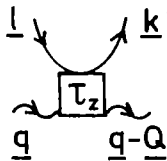
In 2. Quantisierung ist dann

$$U_2 = \sum_{\underline{r}_z} \sum_{\underline{k}, \underline{l}} \sum_{\underline{q}, \underline{Q}} \gamma_{\underline{k}, \underline{l}}^{\underline{q}, \underline{k}+\underline{r}_z} \phi_{\underline{q}} \phi_{\underline{q}-\underline{Q}}^+ c_{\underline{k}}^+ c_{\underline{l}} \quad (5.15a)$$

mit

$$\gamma_{\underline{k}, \underline{l}}^{\underline{q}, \underline{Q}+\underline{r}_z} = -\frac{1}{2M} \sum_{\underline{r}_\perp} (\underline{\varepsilon}_{\underline{q}} \cdot (\underline{Q}+\underline{r}_\perp)) (\underline{\varepsilon}_{\underline{q}-\underline{Q}}^* \cdot (\underline{Q}+\underline{r}_\perp)) u_{\underline{Q}+\underline{r}_\perp} \langle \underline{k} | e^{i(\underline{Q}+\underline{r}_\perp)\underline{r}_\perp} | \underline{l} \rangle \quad (5.15b)$$

$\gamma_{\underline{k}, \underline{l}}^{\underline{q}, \underline{Q}+\underline{r}_z}$ stellen wir durch folgendes Symbol dar:



Mit den im letzten Abschnitt definierten Größen und $\underline{\varepsilon}_{\underline{q}}$ parallel zur Kettenrichtung ist

$$\gamma_{\underline{k}, \underline{l}}^{\underline{q}, \underline{Q}+\underline{r}_z} = -\frac{\varepsilon_{\parallel} \Omega^2}{2N} \frac{1}{\sqrt{4\pi Z^2 e^2}} (Q_z + r_z)^2 \tilde{u}_{Q_\perp, Q_z + r_z} \cdot H(\underline{1} + \underline{Q} + \underline{r}_z - \underline{k}) M_{\underline{k}, \underline{l}}^{\underline{Q}, \underline{r}_z} \quad (5.16)$$

Falls $\phi_{R_\perp} \equiv 0$ ist, erhalten wir

$$\begin{aligned}
 \gamma_{\underline{l}}^{\underline{Q}, \underline{Q}+\underline{r}_z} &= -\frac{\varepsilon_{\parallel} \Omega^2}{2N} \frac{1}{\sqrt{4\pi Z^2 e^2}} (Q_z + r_z)^2 \tilde{u}_{Q_\perp, Q_z + r_z} \delta_{\underline{k}, \underline{l}} \delta_{\underline{k}, \underline{l} + \underline{Q}_\perp} \\
 &\cdot \sum_{\mu=-2}^2 \zeta_\mu (1_z, 1_z + Q_z + r_z) \delta_{\underline{k}_z, \underline{l}_z + Q_z + r_z + \mu 2k_F} \quad \text{und damit}
 \end{aligned} \quad (5.17)$$

$$U_2^0 = \sum_{\underline{r}_z} \sum_{\underline{k}} \sum_{\underline{q}, \underline{Q}} \gamma_{\underline{q}, \underline{Q}+\underline{r}_z}^0 \phi_{\underline{q}} \phi_{\underline{q}-\underline{Q}}^+ \sum_{\mu} \zeta_\mu (k_z, k_z + Q_z + r_z) c_{\underline{k}_\perp + \underline{Q}_\perp, k_z + Q_z + r_z + \mu 2k_F}^+ c_{\underline{k}} \quad (5.18)$$

Ergänzung zu $U_o^U(r)$ (s.S. 15):

Mit dem in diesem Abschnitt berechneten und definierten Größen formen wir U_o^U für die folgenden Rechnungen in Abschnitt 10 noch etwas um:

$$\begin{aligned}
 U_o^U &= N \sum_{\tau_z \neq 0} \sum_{\underline{k}, \underline{l}} \sum_{\tau_x, \tau_y} u_{\underline{\tau}} \langle \underline{k} | e^{i\underline{\tau} \underline{r}} | \underline{l} \rangle c_{\underline{k}}^+ c_{\underline{l}} \\
 &= \sum_{\tau_z \neq 0} \sum_{\underline{k}, \underline{l}} \Gamma_{\underline{k}, \underline{l}}^{\tau_z} c_{\underline{k}}^+ c_{\underline{l}}
 \end{aligned}
 \tag{5.19a}$$

mit

$$\begin{aligned}
 \Gamma_{\underline{k}, \underline{l}}^{\tau_z} &= H(1 + \tau_z - \underline{k}) M_{\underline{k}_z, \underline{l}_z}^{\tau_z} N \sum_{\tau_{\perp}} \Lambda_{\tau_{\perp}} u_{\tau_{\perp}, \tau_z} \\
 &= H(1 + \tau_z - \underline{k}) M_{\underline{k}_z, \underline{l}_z}^{\tau_z} N \sqrt{4\pi Z^2 e^2} \tilde{u}_o
 \end{aligned}
 \tag{5.19b}$$

Für $\phi_{R_{\perp}} \equiv 0$ ist

$$\Gamma_{\underline{k}, \underline{l}}^{\tau_z} = \delta_{\underline{k}_{\perp}, \underline{l}_{\perp} + \underline{q}_{\perp}} N \sqrt{4\pi Z^2 e^2} \tilde{u}(0, 0, \tau_z) M_{\underline{k}_z, \underline{l}_z}^{\tau_z}
 \tag{5.20}$$

und

$$U_o^U = \sum_{\tau_z \neq 0} \sum_{\underline{k}} N \sqrt{4\pi Z^2 e^2} \tilde{u}(0, 0, \tau_z) \cdot \sum_{\mu} \zeta_{\mu}(\underline{k}_z, \underline{k}_z + \tau_z) c_{\underline{k}_{\perp}, \underline{k}_z + \tau_z + \mu 2k_F}^+ c_{\underline{k}}
 \tag{5.21}$$

6. Elektron-Elektron-Wechselwirkung

Die Elektronen wechselwirken untereinander durch das Coulomb-Potential

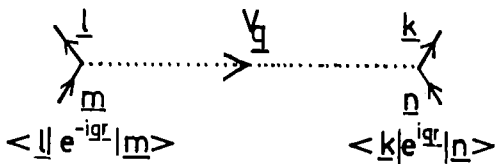
$$V(\underline{r}-\underline{r}') = \frac{e^2}{\sqrt{\epsilon_{\perp}^2 \epsilon_{\parallel}}} \left| \left(\frac{x-x'}{\sqrt{\epsilon_{\perp}}}, \frac{y-y'}{\sqrt{\epsilon_{\perp}}}, \frac{z-z'}{\sqrt{\epsilon_{\parallel}}} \right) \right|^{-1}$$

wobei durch ϵ_{\perp} , ϵ_{\parallel} , wie im letzten Abschnitt erläutert, die nicht mikroskopisch erfaßten Abschirmeffekte berücksichtigt werden. Der zweitquantisierte Wechselwirkungsoperator ist

$$\begin{aligned} v^{el-el} &= \frac{1}{2} \sum_{\underline{k}\underline{l}\underline{m}\underline{n}} \langle \underline{k} | \langle \underline{l} | v(\underline{r}-\underline{r}') | \underline{m} \rangle | \underline{n} \rangle c_{\underline{k}}^+ c_{\underline{l}}^+ c_{\underline{m}} c_{\underline{n}} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\underline{q}} \sum_{\underline{k}\underline{l}\underline{m}\underline{n}} v_{\underline{q}} \langle \underline{k} | e^{i\underline{q}\underline{r}} | \underline{n} \rangle \langle \underline{l} | e^{-i\underline{q}\underline{r}'} | \underline{m} \rangle c_{\underline{k}}^+ c_{\underline{l}}^+ c_{\underline{m}} c_{\underline{n}} \end{aligned}$$

$$\text{mit } v_{\underline{q}} = \frac{4\pi e^2}{\epsilon_{\perp} (q_x^2 + q_y^2) + \epsilon_{\parallel} q_z^2} \quad (6.2)$$

Die durch v^{el-el} beschriebenen Prozesse verdeutlichen wir durch ein Diagramm:



Weitere Umformungen ergeben:

$$\begin{aligned} v^{el-el} &= \frac{1}{2} \sum_{\underline{k}, \underline{l}, \underline{m}, \underline{n}} c_{\underline{k}}^+ c_{\underline{l}}^+ c_{\underline{m}} c_{\underline{n}} \sum_{\underline{q}} v_{\underline{q}} \{ \Lambda_{\underline{q}_{\perp}} M_{\underline{k}_z, \underline{n}_z}^{q_z} H(\underline{n} + \underline{q} - \underline{k}) \} \{ \Lambda_{\underline{q}_{\perp}} M_{\underline{m}_z, \underline{l}_z}^{q_z} H(\underline{l} + \underline{q} - \underline{m}) \}^* \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\underline{k}, \underline{l}, \underline{m}, \underline{n}} c_{\underline{k}}^+ c_{\underline{l}}^+ c_{\underline{m}} c_{\underline{n}} \cdot \sum_{\underline{q}_{\perp}, q_z} \tilde{v}_{\underline{q}} \{ H(\underline{n} + \underline{q} - \underline{k}) M_{\underline{k}_z, \underline{n}_z}^{q_z} \} \{ H(\underline{l} + \underline{q} - \underline{m}) M_{\underline{m}_z, \underline{l}_z}^{q_z} \}^* \end{aligned}$$

mit dem modifizierten Elektron-Elektron-Potential

$$\tilde{v}_{\underline{q}} = \sum_{\tau_{\perp}} \Lambda_{\underline{q}_{\perp}}^2 \frac{4\pi e^2}{\epsilon_{\perp} ((q_x + \tau_x)^2 + (q_y + \tau_y)^2) + \epsilon_{\parallel} q_z^2} \quad (6.3)$$

Der Summationsbereich von q_{\perp} ist nun ebenfalls, wie der von k_{\perp} , l_{\perp} usw., durch $-\left(\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\right) < q_{\perp} \leq \left(\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\right)$ gegeben. Für den Spezialfall $\phi_{R_{\perp}} \equiv 0$ erhalten wir

$$\frac{0}{V} \text{el-el} = \frac{1}{2} \sum_{\underline{k}, \underline{l}} \sum_{\underline{q}} \tilde{V}_{\underline{q}} \sum_{\mu} \zeta_{\mu}(k_z, k_z + q_z) \zeta_{\tilde{\mu}}(l_z, l_z + q_z) \quad (6.4)$$

$$+ c_{k_{\perp}+q_{\perp}, k_z+q_z+\mu 2k_F}^+ c_{l_{\perp}+q_{\perp}, l_z+q_z+\tilde{\mu} 2k_F}^+ c_{\underline{k}}$$

Wie bei der Elektron-Phonon-Wechselwirkung haben wir also auch hier anomale Terme.

Da wir die elektronischen Wellenfunktionen in Kettenrichtung als nahezu freie Elektronen approximiert haben, treten bei der Elektron-Elektron-Wechselwirkung keine Umklapp-Prozesse auf.

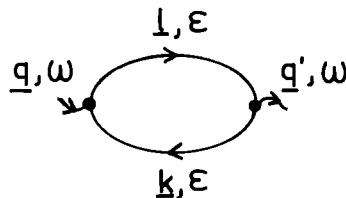
B) Methode

In diesem Abschnitt wird die Methode, die wir zur Berechnung des Phononenpropagators verwenden, erläutert. Wir werden skizzieren, welche Rolle anomale Polarisationsbeiträge spielen und in diesem Zusammenhang den Begriff Amplituden- und Phasenmode erläutern.

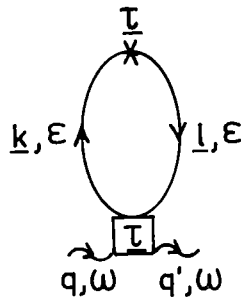
7. Renormierung des Phononenpropagators, qualitative Resultate

Wir gehen bei allen Rechnungen davon aus, daß ein vollständig geordnetes Kettensystem vorliegt, und zwar sollen alle Überstrukturphasen gleich sein: $\phi(R_{\perp}) \equiv 0$. Welchen Einfluß eine andere Phasenordnung oder eine statistische Verteilung der Phasen auf die Phonondispersion und damit zusammenhängende physikalische Eigenschaften des Peierlssystems hat, untersuchen wir in Abschnitt 11. Wir berechnen die (longitudinale) Phonondispersion für \underline{q} -Werte in Kettenrichtung, d.h. $q_z^2 \gg q_x^2 + q_y^2$, da die "eindimensionalen" Effekte für parallele Anordnung der Überstrukturphasen dort am deutlichsten hervortreten.

Die Renormierung des Phononenpropagators geschieht in random-phase approximation (RPA), d.h. durch Summation irreduzibler Selbstenergieanteile vom Typ



Bei Mitnahme von Umklapp-Prozessen (Abschnitt 10) kommt dazu noch folgender irreduzibler Selbstenergieanteil, der ebenfalls von zweiter Ordnung in der Phononamplitude ist:



Wie aus der Definition von U_0^u (S. 9) hervorgeht, ist dabei stets $\tau_z \neq 0$. Dieser Term kommt also nur durch Umklapp-Prozesse ins Spiel und wird zur korrekten Beschreibung des Verhaltens der Phonondispersion für $\underline{q} \rightarrow 0$ benötigt (/24/, s.a. S. 57).

Diese (phononirreduziblen) Selbstenergieanteile werden in Abschnitt 9 noch bezüglich der Coulomb-Wechselwirkung der Elektronen untereinander (ebenfalls in RPA) renormiert. Wie aus der Indizierung der obigen Graphen hervorgeht, arbeiten wir in adiabatischer Näherung, verwenden also nur statische Polarisationsbeiträge. Das begründen wir damit, daß die uns interessierenden Phononenenergien (< 50 meV) wesentlich kleiner als typische Energien der Elektronen ($E_F = 3250$ meV, bzw. $2\Delta = 200$ meV) sind. Alle Rechnungen zur Phonondispersion sind für $T = 0$ durchgeführt. Da die in Abb. 3 dargestellte Phononanomalie für Temperaturen $T < 100$ K auftritt, was einer thermischen Energie $k_B T \approx 9$ meV entspricht und damit ebenfalls wesentlich unterhalb typischer Elektronenenergien liegt, erscheint diese Näherung gerechtfertigt.⁺⁾

Im folgenden soll nun unsere Renormierungsmethode erläutert werden. Dazu betrachten wir ein Elektron-Phonon-System ohne Elektron-Elektron-Wechselwirkung und Umklapp-Prozesse. Der Hamiltonoperator besteht also lediglich aus dem der Peierlselectronen, dem Anteil der unrenormierten Phononen und der Elektron-Phonon-Kopplung ohne Umklapp-Prozesse (Fröhlich-Modell):

$$H = \sum_{\underline{k}} E_{-k} c_{\underline{k}}^+ c_{\underline{k}} + \sum_{\underline{q}} \Omega_{\underline{q}} b_{\underline{q}}^+ b_{\underline{q}} + \sum_{\underline{k}, \underline{l}, \underline{q}} g_{\underline{k}, \underline{l}, \underline{q}} c_{\underline{k}}^+ c_{\underline{l}} c_{\underline{q}} \quad (7.1)$$

Für ein freies Elektronengas, in dem die elektronischen Wellenfunktionen durch ebene Wellen dargestellt sind, würde die Dyson-Gleichung für den Phononpropagator im geschilderten Modell lauten:

In unserem Peierlssystem treten wegen des anderen Charakters der Elektronen-Wellenfunktion jedoch auch anomale Vertices (s. Abschnitt 5 und 6) und damit anomale Polarisationsbeiträge auf: Im Polarisationsgraphen

$$\text{kann } q'_z = \begin{cases} q_z \\ q_z \pm 2k_F \\ q_z \pm 4k_F \end{cases} \text{ sein.}$$

⁺⁾ Lediglich im Streugesetz $S(k, \omega)$ (Kap. III) verwenden wir für die Phononenbesetzungszahl Temperaturen $T \neq 0$, da typische Phononenenergien mit den thermischen Energien für $T \lesssim 100$ K vergleichbar sind.

Die möglichen Werte für $q'_\perp = (q'_x, q'_y)$ sind durch die Korrelation der Überstrukturphasen bestimmt. In unserem Fall paralleler Anordnung ($\phi_{R\perp} \equiv 0$), ist $q'_\perp = q_\perp$ (s. Abschnitt 8 und 11).

Diese anomalen Graphen vermitteln also eine Kopplung von Phononen, deren Wellenzahlvektoren sich in den z-Komponenten um $\pm 2k_F$ oder $\pm 4k_F$ unterscheiden. Diese indirekte, über das Elektronensystem vermittelte Phonon-Phonon-Wechselwirkung führt, wie wir sehen werden, bei $|q_z| = 2k_F$ zu deutlichen Veränderungen in der Phononendispersion.

Um die Rechnung nicht übermäßig zu komplizieren, nehmen wir nur die für die $2k_F$ -Anomalie, der unser Hauptaugenmerk gilt, wichtigste Wechselwirkung $q_z \rightleftharpoons q_z - 4k_F \text{ sign } q_z$ mit. Sie koppelt u.a. die entarteten $q_z = \pm 2k_F$ -Phononen und führt so an diesen Stellen zu einem Gap in der Phononendispersion.⁺⁾

Mit diesen anomalen Termen gelangen wir zu einem System gekoppelter Dyson-Gleichungen (vgl. LRA / 8/):

$$\begin{aligned}
 \text{---} \overline{q} \text{---} &= \text{---} \overline{q} \text{---} + \text{---} \overline{q} \text{---} \text{---} \overline{q} \text{---} \text{---} \overline{q} \text{---} + \text{---} \overline{q} \text{---} \text{---} \overline{q}' \text{---} \text{---} \overline{q} \text{---} \\
 \text{---} \overline{q}' \text{---} &= \text{---} \overline{q}' \text{---} \text{---} \overline{q}' \text{---} \text{---} \overline{q} \text{---} + \text{---} \overline{q}' \text{---} \text{---} \overline{q} \text{---} \text{---} \overline{q}' \text{---} \\
 \text{---} \overline{q} \text{---} \overline{q}' \text{---} &= \text{---} \overline{q} \text{---} \text{---} \overline{q} \text{---} \text{---} \overline{q}' \text{---} + \text{---} \overline{q} \text{---} \text{---} \overline{q}' \text{---} \text{---} \overline{q}' \text{---} \\
 \text{---} \overline{q}' \text{---} \overline{q}' \text{---} &= \text{---} \overline{q}' \text{---} + \text{---} \overline{q}' \text{---} \text{---} \overline{q}' \text{---} \text{---} \overline{q}' \text{---} + \text{---} \overline{q}' \text{---} \text{---} \overline{q} \text{---} \text{---} \overline{q}' \text{---}
 \end{aligned} \tag{7.2}$$

⁺⁾ Bei der Coulombnormierung der Polarisationssterme lassen wir außerdem noch anomale Terme $q_z \rightleftharpoons q_z - 2k_F \text{ sign } q_z$ zu. Diese Terme sind deshalb wichtig, da sie die $\pm 2k_F$ -Phononen an den weitreichenden ($q \approx 0$) Anteil der Coulomb-Wechselwirkung ankoppeln.

In diesen Gleichungen ist $\underline{q}' = (q_x, q_y, q_z - 4k_F \text{ sign } q_z)$. (Der Übersichtlichkeit halber haben wir die Indizierung der Elektron-Propagatoren und die Phononfrequenzen weggelassen.) Wir definieren die Matrizen

$$\underline{d}(\underline{q}, \omega) = \begin{pmatrix} d(\underline{q}, \underline{q}, \omega) & d(\underline{q}, \underline{q}', \omega) \\ d(\underline{q}', \underline{q}, \omega) & d(\underline{q}', \underline{q}', \omega) \end{pmatrix}$$

$$\underline{d}_o(\underline{q}, \omega) = \begin{pmatrix} d_o(\underline{q}, \omega) & 0 \\ 0 & d_o(\underline{q}', \omega) \end{pmatrix}$$

$$\underline{\Pi}(\underline{q}) = \begin{pmatrix} \Pi(\underline{q}, \underline{q}) & \Pi(\underline{q}, \underline{q}') \\ \Pi^*(\underline{q}, \underline{q}') & \Pi(\underline{q}', \underline{q}') \end{pmatrix}$$

$$id(\underline{q}, \underline{q}', \omega) \cong \begin{array}{c} \underline{q}, \omega \quad \underline{q}', \omega \\ \text{---} \end{array}$$

$$id(\underline{q}, \omega) \cong \begin{array}{c} \underline{q}, \omega \\ \text{---} \end{array}$$

$$-i\Pi(\underline{q}, \underline{q}') = \begin{array}{c} \underline{q}, \omega \quad \underline{q}', \omega \\ \text{---} \end{array}$$

(Π ist in adiabatischer Näherung unabhängig von ω , außerdem wurde $\Pi(\underline{q}', \underline{q}) = \Pi^*(\underline{q}, \underline{q}')$ verwendet.)

Mit Hilfe dieser Matrizen übersetzen wir die Gleichungen (7.2):

$$\underline{d} = \underline{d}_o + \underline{d}_o \underline{\Pi} \underline{d}$$

$$\underline{d} = (1 - \underline{d}_o \underline{\Pi})^{-1} \underline{d}_o$$

$$\underline{d} = (\underline{d}_o^{-1} - \underline{\Pi})^{-1}$$

Mit $d_o(\underline{q}, \omega) = (\omega^2 - \Omega^2)^{-1}$ ist also

$$\underline{d}(\underline{q}, \omega) = \frac{\begin{pmatrix} \omega^2 - \Omega^2 - \Pi(\underline{q}', \underline{q}') & -\Pi(\underline{q}, \underline{q}') \\ -\Pi^*(\underline{q}, \underline{q}') & \omega^2 - \Omega^2 - \Pi(\underline{q}, \underline{q}) \end{pmatrix}}{(\omega^2 - \Omega^2 - \Pi(\underline{q}, \underline{q})) (\omega^2 - \Omega^2 - \Pi(\underline{q}', \underline{q}')) - |\Pi(\underline{q}, \underline{q}')|^2} \quad (7.3)$$

Wir diagonalisieren $\underline{d}(\underline{q}, \omega)$ und erhalten damit:

a) Durch die Eigenvektoren von \underline{d} die Transformationsgleichungen auf neue Phononfeldamplituden $\phi_\lambda(\underline{q}, t)$, $\lambda = 1, 2$, für die nun

$$\text{ex} \langle 0 | \phi_\lambda(\underline{q}, t) \phi_{\lambda'}^+(\underline{q}', t') | 0 \rangle \text{ex} \sim \delta_{\underline{q}, \underline{q}'} \delta_{\lambda\lambda'}$$

gilt: die durch die $\phi_\lambda(\underline{q}, t)$ beschriebenen Phononen sind wechselwirkungsfrei.

b) In Form der Eigenwerte von \underline{d} die zugehörigen renormierten Propagatoren

$$D_\lambda(\underline{q}, \omega) = \int dt e^{i\omega t} (-i) \text{ex} \langle 0 | T \{ \phi_\lambda(\underline{q}, t) \phi_\lambda^+(\underline{q}, 0) \} | 0 \rangle \text{ex} \quad (7.4)$$

und damit die renormierten Phononenfrequenzen $\omega_\lambda(\underline{q})$.

Wir nehmen vorweg, daß die Matrix $\underline{\Pi}(\underline{q})$ reell, also insbesondere $\Pi(\underline{q}, \underline{q}') = |\Pi(\underline{q}, \underline{q}')| \text{sign} \Pi(\underline{q}, \underline{q}')$ ist (s. Abschnitt 8), und erhalten so für die $\phi_\lambda(\underline{q}, t)$:

$$\begin{pmatrix} \phi_1(\underline{q}, t) \\ \phi_2(\underline{q}, t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \chi_{\underline{q}} & -\text{sign} \Pi(\underline{q}, \underline{q}') \cdot \sin \chi_{\underline{q}} \\ \text{sign} \Pi(\underline{q}, \underline{q}') \cdot \sin \chi_{\underline{q}} & \cos \chi_{\underline{q}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_{\underline{q}}(t) \\ \phi_{\underline{q}'}(t) \end{pmatrix} \quad (7.5a)$$

mit

$$\frac{\cos^2 \chi_{\underline{q}}}{\sin^2 \chi_{\underline{q}}} = \frac{1}{2} \left(1 \pm \frac{x_{\underline{q}}}{\sqrt{1 + x_{\underline{q}}^2}} \right) \quad ; \quad x_{\underline{q}} = \frac{\bar{\Omega}^2(\underline{q}) - \bar{\Omega}^2(\underline{q}')}{2|\Pi(\underline{q}, \underline{q}')|^2} \quad (7.5b)$$

Die zugehörigen Phononenfrequenzen $\omega_\lambda(\underline{q})$ sind mit der "normal renormierten" Frequenz

$$\bar{\Omega}^2(\underline{q}) = \Omega^2 + \Pi(\underline{q}, \underline{q}) \quad (7.6a)$$

die vollständig (unter Einschluß anomaler Polarisationssterme) renormierten Frequenzen:

$$\omega_{1,2}(\underline{q}) = \frac{\bar{\Omega}^2(\underline{q}) + \bar{\Omega}^2(\underline{q}')}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\bar{\Omega}^2(\underline{q}) - \bar{\Omega}^2(\underline{q}')}{2} \right)^2 + |\Pi(\underline{q}, \underline{q}')|^2} \quad (7.6b)$$

Mit diesen Frequenzen, lassen sich die renormierten Phononpropagatoren

$D_\lambda(\underline{q}, \omega)$ (Glg. (7.4)) formal angeben:

$$D_\lambda(\underline{q}, \omega) = \frac{1}{\omega^2 - \omega_\lambda^2(\underline{q}) + i\delta} \quad , \quad \lambda = 1, 2 \quad (7.7)$$

(δ : positive Infinitesimale)

Wir definieren die Erzeuger $B_{\lambda}^{+}(\underline{q}, t)$ bzw. Vernichter $B_{\lambda}(\underline{q}, t)$ der renormierten Phononen über dieselben Transformationsgleichungen aus den unrenormierten $b_{\underline{q}}^{+}(t)$, $b_{\underline{q}}(t)$. Damit erfüllen sie die Bose-Kommutatorrelationen, und der Hamiltonoperator der in der angegebenen Näherung renormierten Phononen läßt sich schreiben als

$$H^{\text{Ph}} = \sum_{\underline{q}, \lambda} \omega_{\lambda}(\underline{q}) N_{\lambda}(\underline{q}) \quad (7.8)$$

mit dem Phononenzahloperator $N_{\lambda}(\underline{q}) = B_{\lambda}^{+}(\underline{q}) B_{\lambda}(\underline{q})$. Die $\phi_{\lambda}(\underline{q})$ stehen mit den $B_{\lambda}(\underline{q})$ im Zusammenhang

$$\phi_{\lambda}(\underline{q}, t) = \frac{B_{\lambda}(\underline{q}, t) + B_{\lambda}^{+}(-\underline{q}, t)}{\sqrt{2\omega_{\lambda}(\underline{q})}} \quad (7.9)$$

Wie für die $\phi_{\underline{q}}(t)$ gilt $\phi_{\lambda}(-\underline{q}, t) = \phi_{\lambda}^{+}(\underline{q}, t)$.

In Abb. 7 ist die durch $\Pi(\underline{q}, \underline{q}')$ zustandekommende Phonon-Phonon-Kopplung $q_z \xrightarrow{\quad} q_z - 4k_F \text{sign } q_z$ skizziert.

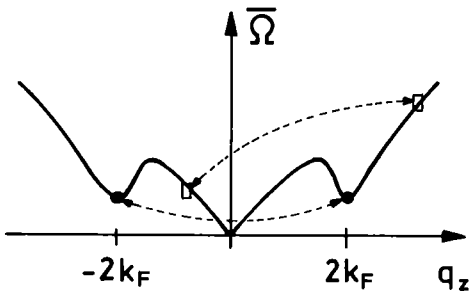


Abb. 7

Normal renormierte Phononendispersion (durchgezogene Linie) und zwei Beispiele für $4k_F$ -Phonon-Phonon-Kopplung durch $\Pi(\underline{q}, \underline{q}')$ (gestrichelt).

Sie führt zu den beiden renormierten Phononenzweigen, die durch ϕ_{λ} und ω_{λ} beschrieben sind. Das Gewicht, mit dem die Phononamplituden ϕ_{λ} der beiden Zweige bei vorgegebenem \underline{q} die Ionenauslenkungen bestimmen und damit in das Neutronenstreugesetz $S(\underline{k}, \omega)$ (s. Kap. III) eingehen, ist durch die Transformationskoeffizienten $\cos \chi_{\underline{q}}$ und $\sin \chi_{\underline{q}}$ (Glg. (7.5)) gegeben. Für $\underline{q} = (q_x, q_y, \pm 2k_F)$ sind die Phononenfrequenzen $\bar{\Omega}(\underline{q})$ und $\bar{\Omega}(\underline{q}') = \bar{\Omega}(q_x, q_y, q_z - 4k_F \text{sign } 4k_F)$ entartet, überdies ist $\Pi(\underline{q}, \underline{q}')$ an dieser Stelle maximal (s. folgender Abschnitt): die Phonon-Phonon-Kopplung ist hier am "effektivsten". Beide Zweige besitzen gleiches Gewicht, und im bezüglich " $\tau_z = 4k_F$ " ausgedehnten Zonenschema, in dem nur der jeweils dominierende Phononenzweig eingezeichnet ist, tritt an dieser Stelle ein Gap auf (Abb. 8).

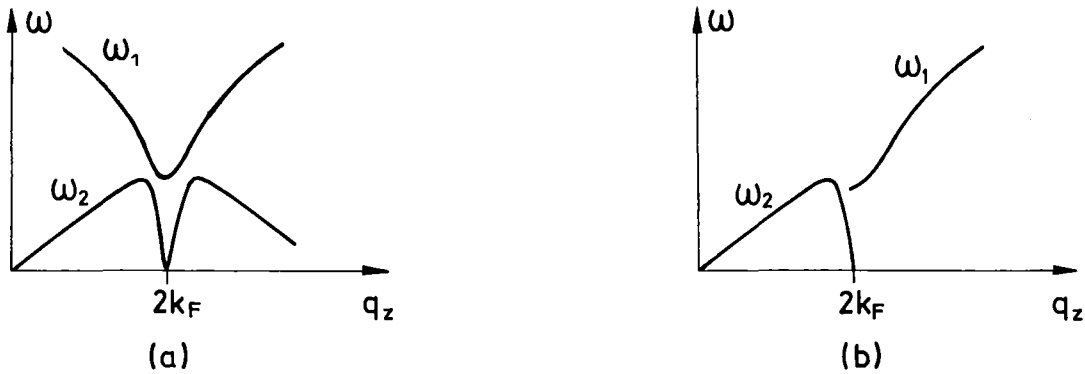


Abb. 8

Renormierte Phonondispersion im bezüglich " τ " = $4k_F$ wiederholten (a) und ausgedehnten (b) Zonenschema ($\Pi(\underline{q}, \underline{q}') < 0$). (Im Fröhlich-Modell ist $\omega_2(2k_F) = 0$ /8/.)

Wir betrachten einige Spezialfälle der Gleichungen (7.5) und (7.6):

- i) $q_z \rightarrow 0$ (d.h. $|q'_z| \rightarrow 4k_F$), $q_x = q_y = 0$.
 Es ist dann $\bar{\omega}^2(\underline{q}') > \bar{\omega}^2(\underline{q})$, außerdem verschwindet $\Pi(\underline{q}, \underline{q}')$ in diesem Limes (s. folgender Abschnitt). Daraus folgt

$$\begin{aligned}
 \cos \chi_{\underline{q}} &\rightarrow 0 & \sin \chi_{\underline{q}} &\rightarrow 1 \\
 \phi_1(\underline{q}, t) &\rightarrow -\text{sign } \Pi(\underline{q}, \underline{q}') \cdot \bar{\phi}_{\underline{q}'}(t) & \phi_2(\underline{q}, t) &\rightarrow \text{sign } \Pi(\underline{q}, \underline{q}') \cdot \bar{\phi}_{\underline{q}}(t) \\
 \omega_1(\underline{q}) &\rightarrow \bar{\omega}(\underline{q}') = \bar{\omega}(0, 0, 4k_F) & \omega_2(\underline{q}) &\rightarrow \bar{\omega}(\underline{q}) = 0
 \end{aligned} \tag{7.10a}$$

- ii) $q_z = 2k_F$, $q_x = q_y = 0$
 Es ist $\bar{\omega}^2(\underline{q}') = \bar{\omega}^2(\underline{q})$, außerdem ist $\Pi(\underline{q}, \underline{q}')$ maximal (s. folgender Abschnitt). Es ist also

$$\begin{aligned}
 \cos \chi_{\underline{q}} &= \sin \chi_{\underline{q}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \\
 \phi_2(\underline{q}, t) &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\bar{\phi}_{\underline{q}}(t) \mp \text{sign } \Pi(\underline{q}, \underline{q}') \cdot \bar{\phi}_{\underline{q}'}(t)) \\
 \omega_2(\underline{q}) &= \bar{\omega}^2(\underline{q}) \pm |\Pi(\underline{q}, \underline{q}')| = \bar{\omega}^2 + \Pi(\underline{q}, \underline{q}) \pm |\Pi(\underline{q}, \underline{q}')|
 \end{aligned} \tag{7.10b}$$

iii) $q_z \rightarrow 4k_F$ $q_x = q_y = 0$
 Dann ist $\bar{\Omega}^2(\underline{q}') < \bar{\Omega}^2(\underline{q})$, $\Pi(\underline{q}, \underline{q}')$ verschwindet mit wachsendem q_z , wie der folgende Abschnitt zeigt, und

$$\begin{aligned} \cos\chi_{\underline{q}} &\rightarrow 1 & \sin\chi_{\underline{q}} &\rightarrow 0 \\ \phi_1(\underline{q}, t) &\rightarrow \bar{\Phi}_{\underline{q}}(t) & \phi_2(\underline{q}, t) &\rightarrow \bar{\Phi}_{\underline{q}'}(t) \\ \omega_1(\underline{q}) &\rightarrow \bar{\Omega}(\underline{q}) = \bar{\Omega}(0,0,4k_F) & \omega_2(\underline{q}) &\rightarrow \bar{\Omega}(\underline{q}') \rightarrow 0 \end{aligned} \quad (7.10c)$$

iv) Für $q_z \geq 4k_F$ ist $\Pi(\underline{q}, \underline{q}') \equiv 0$ und es gilt

$$\begin{aligned} \phi_1(\underline{q}, t) &= \bar{\Phi}_{\underline{q}}(t) & \phi_2(\underline{q}, t) &= \bar{\Phi}_{\underline{q}'}(t) \\ \omega_1(\underline{q}) &= \bar{\Omega}(\underline{q}) & \omega_2(\underline{q}) &= \bar{\Omega}(\underline{q}') \end{aligned} \quad (7.10d)$$

Bei $\underline{q} = (0,0,2k_F)$ sind die neuen Feldoperatoren $\phi_\lambda(\underline{q}, t)$ also gegeben durch

$$\phi_\lambda((0,0,2k_F), t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\bar{\Phi}_{(0,0,2k_F)}(t) \pm \bar{\Phi}_{-(0,0,2k_F)}(t) \right] \quad (7.11)$$

Je nach Vorzeichen von $\Pi(\underline{q}, \underline{q}')$ ist an dieser Stelle der tieferliegende Zweig ($\lambda = 2$) durch die "+"-Kombination ($\Pi(\underline{q}, \underline{q}') > 0$) oder die "-"-Kombination ($\Pi(\underline{q}, \underline{q}') < 0$) gegeben. Diese Linearkombinationen der ungestörten Feldoperatoren bei $q_z = 2k_F$ sind aus der Arbeit von LRA bekannt / 8 /. Die "+"-Kombination trägt den Namen "Amplituden-Mode", die "-"-Kombination heißt "Phasen-Mode". Die Bezeichnungen rühren daher, daß die Ionenauslenkungen in gewisser Näherung (s. unten) einer Amplituden- bzw. Phasenänderung der Überstruktur entsprechen /5/, /8/. Dies soll in elementarer Form kurz demonstriert werden: In einem Jellium-System, in dem der positive Ladungshintergrund durch die Dichteverteilung in Kettenrichtung

$$\rho(z) = \rho_0 (1 + \delta \sin 2k_F z)$$

gegeben ist (δ : Überstrukturamplitude), führt eine Überlagerung der Phononen mit $\underline{q} = (0,0,2k_F)$ und $\underline{q}' = (0,0,-2k_F)$ zur Teilchenverschiebung (wir lassen die q_x, q_y -Indices weg):

$$\begin{aligned} u(z) &\sim \bar{\Phi}_{2k_F} e^{i2k_F z} + \bar{\Phi}_{-2k_F} e^{-i2k_F z} \\ &= (\bar{\Phi}_{2k_F} + \bar{\Phi}_{-2k_F}) \cos 2k_F z + i(\bar{\Phi}_{2k_F} - \bar{\Phi}_{-2k_F}) \sin 2k_F z \\ &\equiv \bar{\Phi}_+(2k_F) \cos 2k_F z + i \bar{\Phi}_-(2k_F) \sin 2k_F z \end{aligned}$$

u läßt sich also als Summe der durch die "+"-Kombination $\phi_+(2k_F)$ und die "-"-Kombination $\phi_-(2k_F)$ erzeugten Auslenkungen

$$\begin{aligned} u_+(z) &= a_+ \cos 2k_F z & \text{aus } \phi_+(2k_F) \\ u_-(z) &= a_- \sin 2k_F z & \text{aus } i\phi_-(2k_F) \end{aligned}$$

schreiben. (Der Phasenfaktor i ist für die betrachteten Korrelationsfunktionen ohne Bedeutung, beeinflußt darum Phononendispersion und Streugesetz nicht.) Eine Auslenkung u(z) führt zur neuen Dichte

$$\bar{\rho}(z) = \sum_j \delta(z - (Z_j + u(Z_j)))$$

Summiert wird über alle Teilchen j. Für Jellium gilt

$$\begin{aligned} \bar{\rho}(z) &= \int dZ \rho(Z) \delta(z - (Z + u(Z))) \\ &\approx \int dZ \rho(Z) \frac{1}{2\pi} \int dk e^{ikz} e^{-ikZ} (1 - iku(Z)) \\ &= \rho(z) - \frac{d}{dz} \rho(z) u(z) \end{aligned}$$

Damit wird in linearer Näherung bezüglich $2k_F a_+ \cdot \delta^{-1}$, d.h. unter Annahme, daß die Überstruktur-Amplitude δ größer als die Amplitude a_+ ist:

$$\begin{aligned} \bar{\rho}_+(z) &\approx \rho(z) - \rho_0 \frac{d}{dz} u_+(z) \\ &= \rho_0 (1 + (\delta + 2k_F a_+) \sin 2k_F z) \\ \bar{\rho}_-(z) &\approx \rho(z) - \rho_0 \frac{d}{dz} u_-(z) \\ &= \rho_0 + \rho_0 \delta (\sin 2k_F z - 2k_F \frac{a_-}{\delta} \cos 2k_F z) \\ &\approx \rho_0 (1 + \delta \sin 2k_F (z - \frac{a_-}{\delta})). \end{aligned}$$

Dies zeigt die Veränderungen der Überstruktur durch Amplituden- bzw. Phasen-Mode. Diese Phasen-Mode erinnert an die von Fröhlich beschriebene Anregung /7/ (s. Einleitung). LRA zeigten nun die Äquivalenz der Fröhlich-Mode mit dem als Phasen-Mode bezeichneten Phonon der Peierlsphase, indem sie nachwiesen, daß die Phasenmode im Fröhlich-Modell (ohne Coulombkräfte und Gittereffekte) ebenfalls die Frequenz $\omega_-(q_z = 2k_F) = 0$ besitzt und so /8/ dissipationfrei Strom trägt. Diese Äquivalenz beantwortet die in der Einleitung erwähnte Frage nach der grundsätzlichen Sichtbarkeit der Fröhlich-Mode mit inelastischer Neutronenstreuung an Gitterbausteinen positiv.

Die Gleichungen (7.5), (7.6) bieten uns nun die Möglichkeit, über die unmittelbare Umgebung von $|q_z| = 2k_F$ hinaus, in dem die Gleichungen (7.10b) ihre Gültigkeit besitzen, die Phononenoperatoren ϕ_λ und Frequenzen ω_λ zu berechnen und so die Verbindung zum "normalen" Teil der Phononendispersion herzustellen.

C) Rechnung und numerische Ergebnisse

Nachdem wir in Teil B) unsere Methode erläutert und den Charakter der zu erwartenden Ergebnisse skizziert haben, berechnen wir hier quantitativ den Einfluß des quasi-eindimensionalen Elektronengases auf die Phononendispersion. Ausgehend von einem Fröhlich-Modell in Abschnitt 8 werden wir durch Mitnahme der Elektron-Elektron-Wechselwirkung (Abschnitt 9) und von Umklapp-Prozessen (Abschnitt 10) zunehmend realistischer. In Abschnitt 11 untersuchen wir, wie sich die Phononendispersion verändert, wenn wir die bisherige Annahme, daß die Überstrukturphasen streng parallel geordnet sind, fallen lassen.

8. Normale und anomale Polarisationssterme; Fröhlich-Modell

Wir definieren

$$\begin{array}{c} \underline{q} \\ \circlearrowleft \\ \underline{k}, \epsilon \\ \circlearrowright \\ \underline{l}, \epsilon \\ \underline{q}' \end{array} \hat{=} -i \pi_j(\underline{q}), \text{ wobei } \begin{cases} j = 1 \text{ für } \underline{q}' = \underline{q} \\ j = 2 \text{ für } \underline{q}' = (q'_x, q'_y, q_z - 4k_F \text{ sign} q_z) \\ j = 3 \text{ für } \underline{q}' = (q'_x, q'_y, q_z - 2k_F \text{ sign} q_z) \end{cases} \quad (8.1)$$

$$= (-1) \cdot 2 \cdot \sum_{\underline{k}, \underline{l}} \int \frac{d\epsilon}{2\pi} i G(\underline{k}, \epsilon) H(\underline{k} + \underline{q} - \underline{l}) M_{1z, k_z}^q i G(\underline{l}, \epsilon) H^*(\underline{k} + \underline{q}' - \underline{l}) \left(M_{1z, k_z}^{q'} \right)^*$$

Die $\pi_j(\underline{q})$ enthalten also neben den Elektronen-Propagatoren als "Vertices" nur die Auswahlregeln $H(\underline{k} + \underline{q} - \underline{l})$ und M_{1z, k_z}^q , die den Vertices der Elektron-Elektron-Wechselwirkung und der Elektron-Phonon-Wechselwirkung gemeinsam sind. Die separablen Faktoren, die diese Vertices spezifizieren (1 bei Elektron-Elektron-Wechselwirkung (s.S. 24), $-ig^q$ für den Elektron-Phonon-Vertex (s.S. 21)), haben wir bei den $\pi_j(\underline{q})$ weggelassen. Die Elemente etwa der auf S. 29 definierten Matrix Π lassen sich mit den π_j so ausdrücken:

$$\Pi(\underline{q}, \underline{q}) = (-i) g^q \pi_1(\underline{q}) (-i) (g^q)^* = -|g^q|^2 \pi_1(\underline{q}) \quad (8.2a)$$

$$\Pi(\underline{q}, \underline{q}') = (-i) g^q \pi_2(\underline{q}) (-i) (g^{q'})^* \quad (8.2b)$$

Wegen der adiabatischen Näherung sind die π_j von externen Frequenzvariablen unabhängig.

Wir formen $\pi_j(\underline{q})$ um:

$$\begin{aligned} \pi_j(\underline{q}) &= 2 \sum_{\underline{k}_\perp, \underline{l}_\perp} H(\underline{k} + \underline{q} - \underline{l}) H^*(\underline{k} + \underline{q}' - \underline{l}) \sum_{k_z, l_z} \frac{f_{l_z} - f_{k_z}}{E_{k_z} - E_{l_z}} M_{1z, k_z}^q \left(M_{1z, k_z}^{q'} \right)^* \\ &= 2N_\perp H(\underline{q} - \underline{q}') \cdot \sum_{k_z, l_z} \frac{f_{l_z} - f_{k_z}}{E_{k_z} - E_{l_z}} M_{k_z, 1_z}^q \left(M_{k_z, 1_z}^{q'} \right)^* \end{aligned} \quad (8.3)$$

Dabei haben wir (s.Glg. (5.6c))

$$\sum_{\underline{k}_\perp, \underline{l}_\perp} H(\underline{k} + \underline{q} - \underline{l}) H^*(\underline{k} + \underline{q}' - \underline{l}) = \sum_{R_\perp} e^{i(\underline{q}_\perp - \underline{q}'_\perp)R_\perp} e^{-i \frac{q_z - q'_z}{2k_F} \phi_{R_\perp}}$$

verwendet, f_{k_z} ist die Fermifunktion.

Da die Elektronenenergie und damit auch die Elektron-Green-Funktion nur von der z-Komponente des Wellenvektors abhängt, ist nun auch die Polarisierbarkeit $\pi_j(\underline{q})$ des Elektronengases bis auf die Auswahlregel $H(\underline{q} - \underline{q}')$ durch q_z bestimmt.

Für normale Polarisationssterme, $q_z = q'_z$, gilt unabhängig von der Überstruktur-Phasenkorrelation

$$H(\underline{q} - \underline{q}') = \delta_{\underline{q}_\perp, \underline{q}'_\perp} \quad \text{für} \quad q_z = q'_z$$

Für anomale Terme gilt, falls $\phi_{R_\perp} = Q_\perp \cdot R_\perp$ ist⁺⁾ ,

$$H(\underline{q} - \underline{q}') = \delta_{\underline{q}_\perp, \underline{q}'_\perp + \mu Q_\perp} \quad \text{für} \quad q_z = q'_z + \mu 2k_F$$

Wir nehmen $Q_\perp = 0$, d.h. parallele Phasenordnung, an und bekommen damit auch bei anomalen Termen Erhaltung der senkrechten Impulskomponenten.

Mit (vgl. Glg. (5.8)), o.B.d.A. $q_z > 0$,

$$\begin{aligned} M_{k_z, l_z}^{q_z} &= \sum_{\mu=-2}^2 \zeta_\mu(1_z, 1_z + q_z) \delta_{k_z, l_z + q_z + \mu 2k_F} \\ M_{k_z, l_z}^{q_z - 4k_F} &= \sum_{\mu=-2}^2 \zeta_\mu(1_z, 1_z + q_z - 4k_F) \delta_{k_z, l_z + q_z + (\mu-2) \cdot 2k_F} \\ &= \sum_{\mu=-4}^0 \eta_\mu(1_z, 1_z + q_z) \delta_{k_z, l_z + q_z + \mu 2k_F} \\ M_{k_z, l_z}^{q_z - 2k_F} &= \sum_{\mu=-2}^2 \zeta_\mu(1_z, 1_z + q_z - 2k_F) \delta_{k_z, l_z + q_z + (\mu-1) \cdot 2k_F} \\ &= \sum_{\mu=-3}^1 \theta_\mu(1_z, 1_z + q_z) \delta_{k_z, l_z + q_z + \mu 2k_F} \end{aligned}$$

wobei

$$\eta_\mu(1_z, 1_z + q_z) = \zeta_{\mu+2}(1_z, 1_z + q_z - 4k_F) \quad (8.4a)$$

$$\theta_\mu(1_z, 1_z + q_z) = \zeta_{\mu+1}(1_z, 1_z + q_z - 2k_F) \quad (8.4b)$$

ist,

^{+) Falls die ϕ_{R_\perp} statistisch verteilt sind, muß eine Konfigurationsmittelung durchgeführt werden (s. Abschnitt 11).}

erhalten wir für $T = 0$

$$\pi_1(\underline{q}) = \delta_{\underline{q}_\perp, \underline{q}'_\perp} \cdot N_\perp \cdot 2 \sum_{\mu=-2}^2 \int_{-k_F}^{k_F} \frac{d1_z}{2\pi} \frac{\zeta_\mu^2(1_z, 1_z + q_z)}{E_{1_z + q_z + \mu 2k_F} - E_{1_z}} \quad (8.5a)$$

$$\pi_2(\underline{q}) = \delta_{\underline{q}_\perp, \underline{q}'_\perp} \cdot N_\perp \cdot 2 \sum_{\mu=-2}^0 \int_{-k_F}^{k_F} \frac{d1_z}{2\pi} \frac{\zeta_\mu(1_z, 1_z + q_z) \cdot \eta_\mu(1_z, 1_z + q_z)}{E_{1_z + q_z + \mu 2k_F} - E_{1_z}} \quad (8.5b)$$

$$\pi_3(\underline{q}) = \delta_{\underline{q}_\perp, \underline{q}'_\perp} \cdot N_\perp \cdot 2 \sum_{\mu=-2}^1 \int_{-k_F}^{k_F} \frac{d1_z}{2\pi} \frac{\zeta_\mu(1_z, 1_z + q_z) \theta_\mu(1_z, 1_z + q_z)}{E_{1_z + q_z + \mu 2k_F} - E_{1_z}} \quad (8.5c)$$

(Dabei haben wir benutzt, daß die ζ_μ , η_μ , θ_μ reell und bezüglich der Transformation $1_z \xrightarrow{\mu} -(1_z + q_z + \mu 2k_F)$ invariant sind.)

Diese Terme wurden mit der in Glg. (3.14) angegebenen Elektronen-Dispersion numerisch berechnet. Für k_F , Δ und E_F setzten wir die Werte von KCP ein. Das Ergebnis ist in Abb. 10, S. 39, dargestellt. Diese Polarisationssterme verwenden wir in der Berechnung der Phonondispersion.

In den bisherigen Arbeiten zu Phasen- und Amplitudenmode /5/, /8/ wurde für die Elektronen stets mit linearisierter Dispersion

$$\varepsilon_{k_z} = v_F (|k_z| - k_F) \quad (8.6)$$

$$E_{k_z} = \sqrt{\varepsilon_{k_z}^2 + \Delta^2} \cdot \text{sign}(|k_z| - k_F)$$

gearbeitet (s. Abb. 9).



Abb. 9 Linearisierte Elektronendispersion mit und ohne Gap.

Außerdem waren die elektronischen Zustände aus technischen Gründen (wegen des verwendeten Nambu-Formalismus) auf $|k_z| < 2k_F$ begrenzt.

Mit diesen Näherungen haben wir $\pi_1(\underline{q})$ und $\pi_2(\underline{q})$ analytisch berechnet. Wir geben hierzu nur die Ergebnisse an:

Mit den Bezeichnungen

$$W_0(q) = \sqrt{q^2 + \Delta^2} \quad ; \quad W_1(q) = \sqrt{(\varepsilon_F - q)^2 + \Delta^2} \quad ; \quad W_2(q) = \sqrt{\frac{1}{4}(2\varepsilon_F - q)^2 + \Delta^2}$$

$$T_1(q) = \frac{E_F - W_1(q)}{q}$$

$$T_2(q) = \frac{\Delta^2}{q} \frac{1}{W_0(q)} \ln \left| \frac{W_0(q) W_1(q) - \frac{q}{2} (\varepsilon_F - q) + \Delta^2}{W_0(q) E_F + \frac{q}{2} \varepsilon_F + \Delta^2} \right|$$

$$T_3(q) = -\frac{1}{4} \ln \left| \frac{W_1(q) + \varepsilon_F - q}{E_F + \varepsilon_F} \right|$$

$$T_4(q) = \frac{1}{2\varepsilon_F - q} \frac{1}{4W_2(q)} \ln \left| \frac{W_2(q) W_1(q) + \frac{2\varepsilon_F - q}{2} (\varepsilon_F - q) + \Delta^2}{W_2(q) E_F + \frac{2\varepsilon_F - q}{2} \varepsilon_F + \Delta^2} \right|$$

ist für $q_z > 0$

$$\pi_1^1(q) = \delta_{q_\perp, q'_\perp} N_\perp \begin{cases} T_1(v_F q_z) + T_2(v_F q_z) + T_3(v_F q_z) + \left(\frac{(2\varepsilon_F - v_F q_z)^2}{2} + \Delta^2 \right) T_4(v_F q_z) & \text{für } q_z \leq 2k_F \\ T_3(v_F |q_z - 4k_F|) + \left(\frac{(2\varepsilon_F - v_F q_z)^2}{2} + \Delta^2 \right) T_4(v_F |q_z - 4k_F|) & \text{für } 2k_F \leq q_z \leq 4k_F \\ 0 & \text{für } 4k_F \leq q_z \end{cases} \quad (8.7a)$$

$$\pi_2^1(q) = \delta_{q_\perp, q'_\perp} \cdot N_\perp \begin{cases} \Delta^2 T_4(v_F q_z) & \text{für } 0 \leq q_z \leq 2k_F \\ \Delta^2 T_4(v_F |q_z - 4k_F|) & \text{für } 2k_F \leq q_z \leq 4k_F \\ 0 & \text{für } 4k_F \leq q_z \end{cases} \quad (8.7b)$$

$$(v_F = \frac{\varepsilon_F}{k_F})$$

$\pi_2^1(q)$ ist in Abb. 10 zum Vergleich mit der Polarisation $\pi_1(q)$ für quadratische Dispersion aufgetragen. Da der Anstieg v_F der Dispersion in der Gegend der Fermikante bei gegebenem ε_F und k_F nur halb so groß ($v_F = \frac{\varepsilon_F}{k_F}$) wie bei quadratischer Dispersion ($v_F = \frac{2\varepsilon_F}{k_F}$) ist, ist die resultierende Polarisierbarkeit deutlich größer. (Unmittelbar bei $q_z = 2k_F$ ist wegen des Peierlsgaps allerdings $v_F = 0$.) Außerdem fällt ein Minimum zwischen k_F und $2k_F$ auf. Es ist eine Folge der Beschränkung auf Zustände $|k_z| < 2k_F$.

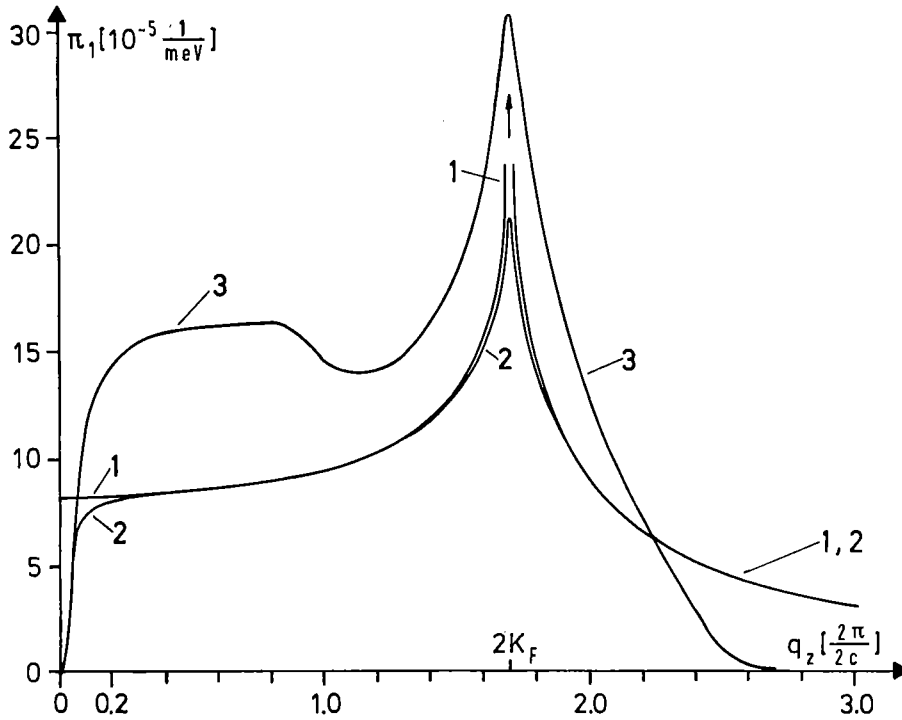


Abb. 10 Normaler Polarisationssterm π_1 (Glg. (8.5a) mit $\epsilon_F = 3250 \text{ meV}$, $\Delta = 100 \text{ meV}$, $2k_F = 1.7 \frac{\pi}{c} \approx 1.86 \text{ \AA}^{-1}$, $N_{\perp} = 1$)
 1: Für Dispersion freier Elektronen (kein Gap: Divergenz bei $2k_F$)
 2: Für quadratische Dispersion mit Gap (Glg. (3.14))
 3: Für lineare Dispersion mit Gap (Glg. (8.6)) unter Berücksichtigung nur der Zustände mit $|k_z| < 2k_F$

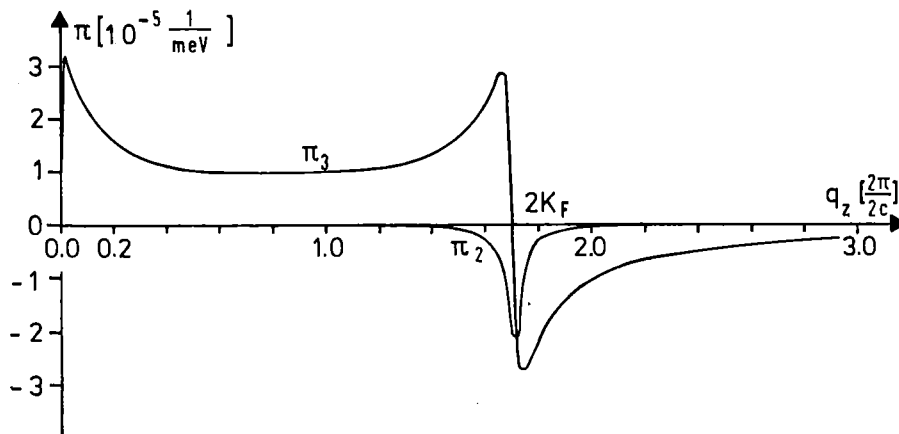


Abb. 10b Anomale Polarisationssterme π_2 und π_3 (Glg. (8.5b), (8.5c)) für die oben genannten Parameter und quadratische Dispersion mit Gap (Glg. (3.14)).

Für $q_z \rightarrow 0$ gilt (mit $N(0) \hat{=} \text{Zustandsdichte an der Fermikante}$)

$$\pi_1^1 \rightarrow \delta_{q_\perp, q'_\perp} N(0) \frac{2}{3} \frac{v_F^2 q_z^2}{4\Delta^2} \rightarrow 0$$

Wegen des Gaps in der Elektronendispersion strebt die Polarisation also nicht gegen einen konstanten Wert, wie im Fall freier Elektronen (s. Abb. 10a), sondern nach Null. $\pi_2^1(q)$ strebt wesentlich schneller, proportional zu $\frac{v_F^2 q_z^2}{\epsilon_F^2}$, gegen Null. Für $q_z \rightarrow 2k_F$ ist

$$\pi_1^1 \rightarrow \delta_{q_\perp, q'_\perp} \cdot N(0) \left(\frac{1}{2} \ln \frac{2\epsilon_F}{\Delta} - \frac{1}{4} - \frac{1}{3} \frac{v_F^2 (q_z - 2k_F)^2}{4\Delta^2} \right) \quad (8.8a)$$

$$\pi_2^1 \rightarrow \delta_{q_\perp, q'_\perp} \cdot N(0) \left(-\frac{1}{4} + \frac{1}{6} \frac{v_F^2 (q_z - 2k_F)^2}{4\Delta^2} \right) \quad (8.8b)$$

($\epsilon_F^2 \gg \Delta^2$ und $v_F^2 (q_z - 2k_F)^2 \ll 4\Delta^2$ vorausgesetzt). π_1^1 und π_2^1 sind bei $q_z = 2k_F$ also extremal.

Für die auf der Basis eines Fröhlich-Hamiltonoperators renormierte Phononendispersion erhalten wir bei $q_z = 2k_F$

$$\begin{aligned} \omega_2^2(q_z) &= \Omega^2 + \Pi(q_z, q_z) \pm |\Pi(q_z, q_z - 4k_F)| \\ &= \Omega^2 - g^2 \pi_1(q_z) \mp g^2 \pi_2(q_z) \quad (\pi_2(q_z) < 0) \\ &= \Omega^2 - g^2 N(0) \left(\frac{1}{2} \ln \frac{2\epsilon_F}{\Delta} - \frac{1}{4} - \frac{2}{6} \frac{v_F^2 (q_z - 2k_F)^2}{4\Delta^2} \right) \\ &\quad \mp g^2 N(0) \cdot \left(-\frac{1}{4} + \frac{1}{6} \frac{v_F^2 (q_z - 2k_F)^2}{4\Delta^2} \right) \\ &= \Omega^2 \left(1 - \lambda \ln \frac{2\epsilon_F}{\Delta} \right) + \frac{\lambda}{2} \Omega^2 + \frac{2}{3} \frac{\lambda \Omega^2}{4\Delta^2} v_F^2 (q_z - 2k_F)^2 \\ &\quad \pm \left(\frac{\lambda}{2} \Omega^2 - \frac{1}{3} \frac{\lambda \Omega^2}{4\Delta^2} v_F^2 (q_z - 2k_F)^2 \right) \end{aligned} \quad (8.9)$$

wobei $\lambda = \frac{g^2 N(0)}{2\Omega^2}$ ist, und g die Elektron-Phonon-Kopplungskonstante bei $q_z = 2k_F$ bedeuten soll. Die Indices $q_x = q_y = 0$ haben wir weggelassen.

Für das Endresultat verwenden wir schließlich noch die BCS-artige Gapgleichung (für ein lineares Fröhlich-Modell), wie sie z.B. von Schuster angegeben wurde /5/

$$1 = \lambda \int_0^{\epsilon_F} d\epsilon \frac{\text{th} \frac{\epsilon}{2k_B T}}{\sqrt{\epsilon^2 + \Delta^2}} \quad T=0 \quad \approx \lambda \ln \frac{2\epsilon_F}{\Delta} \quad (8.10)$$

und erhalten so (für linearisierte Elektronendispersion)

$$\omega_1^2(q_z \approx 2k_F) = \lambda \Omega^2 + \frac{1}{3} \frac{m}{m^*} v_F^2 (q_z - 2k_F)^2 \quad \text{Amplitudenmode} \quad (8.11a)$$

$$\omega_2^2(q_z \approx 2k_F) = 0 + \frac{m}{m^*} v_F^2 (q_z - 2k_F)^2 \quad \text{Phasenmode} \quad (8.11b)$$

Dazu gehört

$$\phi_2(q_z = 2k_F) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_{q_z = 2k_F} + \phi_{q_z = -2k_F}) \quad (8.11c)$$

Das ist das Resultat von LRA /8/ für Phasen- und Amplitudenmode ^{+) (In Anlehnung an diese Arbeit haben wir}

$$\frac{m^*}{m} = 1 + \frac{4\Delta^2}{\lambda\Omega^2} \approx \frac{4\Delta^2}{\lambda\Omega^2}$$

definiert.) Wir sehen, wie in dieser Näherung die Phasenmode für $q_z \rightarrow 2k_F$ mit steiler Tangente nach $\omega = 0$ abfällt.

Für $q_z = 2k_F$ liefert die Näherung, mit linearisierter Elektronen-Dispersion zu arbeiten und Zustände mit $|k_z| > 2k_F$ wegzulassen, die richtigen Ergebnisse. Denn auch für unser Modell nahezu freier Elektronen ergibt sich

$$\begin{aligned} \omega_1^2(q_z = 2k_F) &= \lambda \Omega^2 && \text{Amplituden-Mode} \\ \omega_2^2(q_z = 2k_F) &= 0 && \text{Phasen-Mode} \end{aligned} \quad (8.12)$$

Es ist nämlich (s. Glg. (8.5a)) für $q'_\perp = q_\perp$,

$$\begin{aligned} \pi_1(q_\perp, q_z = 2k_F) &= N_\perp \cdot 4 \cdot \left(\int_{-k_F}^{k_F} \frac{dk}{2\pi} \frac{(A_{k+2k_F} A_k)^2}{E_{k+2k_F} - E_k} \right. \\ &\quad \left. + \int_{-k_F}^0 \frac{dk}{2\pi} \frac{(A_{k+4k_F} B_k)^2}{E_{k+4k_F} - E_k} + \int_0^{k_F} \frac{dk}{2\pi} \frac{(B_{k-2k_F} B_k)^2}{E_{k-2k_F} - E_k} \right) \\ &= N_\perp \cdot 4 \cdot \int_{-k_F}^0 \frac{dk}{2\pi} \frac{(A_{k+2k_F} A_k)^2 + (B_{k+2k_F} B_k)^2}{E_{k+2k_F} - E_k} + T(2k_F) \end{aligned}$$

^{+) In / 8 / ist für den Anstieg der Amplitudenmode irrtümlicherweise ein Faktor $\frac{4}{3} \frac{m}{m^*}$ angegeben.}

mit

$$T(2k_F) = N_{\perp} \cdot 4 \cdot \int_0^{k_F} \frac{dk}{2\pi} \frac{A_k^2}{E_{k+2k_F} - E_k} + \int_0^{k_F} \frac{dk}{2\pi} \frac{B_k^2}{E_{k-4k_F} - E_k}$$

Indem wir die A_k , B_k und E_k von S. 14 einsetzen, erhalten wir^{*)}

$$\pi_1(q_{\perp}, q_z = 2k_F) = 4N_{\perp} \int_{-k_F}^0 \frac{dk}{2\pi} \frac{1}{4\sqrt{\eta_k^2 + \Delta^2}} \cdot \left(1 + \frac{\eta_k^2}{\eta_k^2 + \Delta^2} \right) + T(2k_F)$$

Mit $\eta = v_F (k + k_F)$ und $v_F^2 k_F^2 \gg \Delta^2$ folgt

$$\begin{aligned} \pi_1(q_{\perp}, q_z = 2k_F) &= \frac{N_{\perp}}{2\pi v_F} \int_0^{v_F k_F} d\eta \left(\frac{1}{(\eta^2 + \Delta^2)^{1/2}} + \frac{\eta^2}{(\eta^2 + \Delta^2)^{3/2}} \right) + T(2k_F) \\ &\approx \frac{N(0)}{4} \left(2 \ln \frac{4\varepsilon_F}{\Delta} - 1 \right) + T(2k_F) \end{aligned}$$

(Es gilt $N(0) = N_{\perp} \frac{2}{\pi v_F}$, für parabolische Dispersion ist $N(0) = N_{\perp} \frac{k_F}{\pi \varepsilon_F} = \frac{N}{2\varepsilon_F}$ ($L=1$).)

Dieses Ergebnis erinnert an das Resultat für $\pi_1^1(q_z = 2k_F)$, Glg. (8.8a).

Der "störende" Zusatzterm $T(2k_F)$ beschreibt Streuprozesse $k_z \rightleftharpoons k_z + 2k_F \text{ sign } k_z$ und $k_z \rightleftharpoons k_z - 4k_F \text{ sign } k_z$ und ist wegen der Energiedifferenz im Nenner klein gegenüber dem berücksichtigten Term, der durch die Wechselwirkung $k_z \rightleftharpoons k_z - 2k_F \text{ sign } k_z$ zustande kommt. Wir vernachlässigen T an dieser Stelle, wie wir auch die Prozesse $k_z \rightleftharpoons \{ k_z + 2k_F \text{ sign } k_z, k_z - 4k_F \text{ sign } k_z \}$ bei der Berechnung der Elektronendispersion im Peierlszustand vernachlässigt haben (S.13).

Wir berechnen $\pi_2(q_{\perp}, q_z = 2k_F)$, ($q_{\perp}' = q_{\perp}$)

$$\begin{aligned} \pi_2(q_{\perp}, q_z = 2k_F) &= 4N_{\perp} \cdot \left(\int_{-k_F}^0 \frac{dk}{2\pi} \frac{A_{k+2k_F} A_k B_{k+2k_F} B_k}{E_{k+2k_F} - E_k} + \int_0^{k_F} \frac{dk}{2\pi} \frac{A_{k-2k_F} A_k B_{k-2k_F} B_k}{E_{k-2k_F} - E_k} \right) \\ &= N_{\perp} \cdot 4 \cdot 2 \int_{-k_F}^0 \frac{dk}{2\pi} \frac{-(A_k B_k)^2}{E_{k+2k_F} - E_k} \\ &= -\frac{N_{\perp}}{\pi} \int_{-k_F}^0 dk \frac{\Delta^2}{2(\eta_k^2 + \Delta^2)^{3/2}} \end{aligned}$$

*) $E_k = \frac{(|k| - k_F)}{2m} \pm \text{sign}(|k| - k_F) \cdot \sqrt{\eta_k^2 + \Delta^2}$ für $|k| < 2k_F$

oder

$$\begin{aligned} \pi(q_{\perp}, q_z = 2k_F) &= \frac{N(0)}{4} \Delta^2 \int_0^{v_F k_F} \frac{d\eta}{(\eta^2 + \Delta^2)^{3/2}} \\ &= -\frac{N(0)}{4} \quad (v_F^2 k_F^2 \ll \epsilon_F) \end{aligned} \quad (8.13)$$

Dann ist

$$\begin{aligned} \omega_{\pm}^2(q_z = 2k_F) &= \Omega^2 + \Pi(2k_F, 2k_F) \pm |\Pi(2k_F, -2k_F)| \\ &= \Omega^2 - g^2 \pi_1(2k_F) \mp g^2 \pi_2(2k_F) \\ &= \Omega^2 \left(1 - \lambda \ln \frac{4\epsilon_F}{\Delta} \right) + \frac{\lambda}{2} \Omega^2 \pm \frac{\lambda}{2} \Omega^2 \end{aligned} \quad (8.14)$$

$$\left(\lambda = \frac{g^2 N(0)}{2\Omega^2} \right)$$

Da für ein parabolisches Band $1 - \lambda \ln \frac{4\epsilon_F}{\Delta} = 0$ die Gapgleichung (8.10) bei $T = 0$ ersetzt, folgen daraus die in Glg. (8.12) angegebenen Frequenzen für Phasen- und Amplitudenmode.

9. Coulomb-Renormierung

Wir beziehen nun die Elektron-Elektron-Wechselwirkung in die Renormierung des Phononpropagators mit ein. Der renormierte Propagator ist dann

$$\begin{aligned}
 \underline{q} \quad \underline{q}' &= \delta_{\underline{q},\underline{q}'} \underline{q} + \underline{q} \text{ (loop) } \underline{q}'' \text{ (loop) } \underline{q}' + \underline{q} \text{ (loop) } \underline{q}'' \text{ (loop) } \underline{q}' \\
 &+ \underline{q} \text{ (loop) } \underline{q}'' \text{ (loop) } \underline{q}''' \text{ (loop) } \underline{q}' \\
 &+ \underline{q} \text{ (loop) } \underline{q}'' \text{ (loop) } \underline{q}''' \text{ (loop) } \underline{q}'' \text{ (loop) } \underline{q}' \\
 &+ \underline{q} \text{ (loop) } \underline{q}'' \text{ (loop) } \underline{q}''' \text{ (loop) } \underline{q}'' \text{ (loop) } \underline{q}'' \text{ (loop) } \underline{q}' + \text{höhere Ordnungen}
 \end{aligned}
 \tag{9.1}$$

wobei $\dots \text{>} \underline{q} \dots \hat{=} -i\tilde{V}_{\underline{q}}$, Glg. (6.3), bedeutet.

q'_z, q''_z, q'''_z lassen wir in unserer Rechnung bei Phononpropagatoren einen der Werte $\{q_z, q_z - 4k_F \text{ sign } q_z\}$, für die Elektron-Elektron-Wechselwirkung die Werte $\{q_z, q_z - 4k_F \text{ sign } q_z, q_z - 2k_F \text{ sign } q_z\}$ annehmen. Die (q_x, q_y) Komponenten sind wegen unserer Annahme phasengleicher Ketten bis auf reziproke Gittervektoren erhalten.

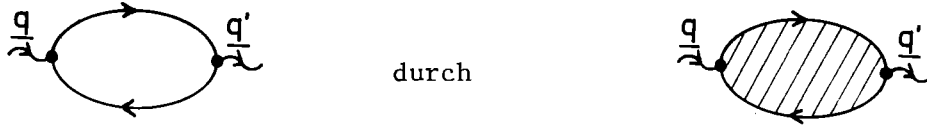
Für die Elektron-Elektron-Wechselwirkung berücksichtigen wir auch die anomalen Graphen, die die Kopplung $q_z \rightleftharpoons q_z - 2k_F \text{ sign } q_z$ beschreiben, da sie für $|q_z| \approx 2k_F$ den weitreichenden Anteil der Coulombkraft ins Spiel bringen. Dieser hat erheblichen Einfluß auf die Phonondispersion bei $q_z = \pm 2k_F$.

Glg. (9.1) läßt sich summieren

$$\underline{q} \quad \underline{q}' = \delta_{\underline{q},\underline{q}'} \underline{q} + \underline{q} \text{ (shaded loop) } \underline{q}'' \quad \underline{q}' \tag{9.2a}$$

$$\begin{aligned}
 \underline{q} \text{ (shaded loop) } \underline{q}' &= \underline{q} \text{ (loop) } \underline{q}' + \underline{q} \text{ (loop) } \underline{q}'' \text{ (loop) } \underline{q}' + \underline{q} \text{ (loop) } \underline{q}'' \text{ (loop) } \underline{q}''' \text{ (loop) } \underline{q}' + \dots \\
 &= \underline{q} \text{ (loop) } \underline{q}' + \underline{q} \text{ (loop) } \underline{q}'' \text{ (shaded loop) } \underline{q}'
 \end{aligned}
 \tag{9.2b}$$

Wir erhalten die Coulomb-renormierte Phononendispersion also dadurch, daß wir in den Gleichungen (7.2)



ersetzen. Den dargestellten Coulomb-renormierten Polarisationssterm bezeichnen wir mit $\Pi^C(\underline{q}, \underline{q}')$.

Die Vielfalt der erlaubten Werte für \underline{q}'' , \underline{q}''' usw. verarbeiten wir wieder mit Hilfe von Matrizen, diesmal 3 x 3 Matrizen.

Für $q_z > 0$, wir lassen die Indices q_x, q_y weg, definieren wir

$$\underline{\pi}(q_z) = \begin{pmatrix} \pi(q_z \rightleftharpoons q_z) & \pi(q_z \rightleftharpoons q_z - 4k_F) & \pi(q_z \rightleftharpoons q_z - 2k_F) \\ \pi(q_z - 4k_F \rightleftharpoons q_z) & \pi(q_z - 4k_F \rightleftharpoons q_z - 4k_F) & \pi(q_z - 4k_F \rightleftharpoons q_z - 2k_F) \\ \pi(q_z - 2k_F \rightleftharpoons q_z) & \pi(q_z - 2k_F \rightleftharpoons q_z - 4k_F) & \pi(q_z - 2k_F \rightleftharpoons q_z - 2k_F) \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \pi_1(q_z) & \pi_2(q_z) & \pi_3(q_z) \\ \pi_2(q_z) & \pi_1(q_z - 4k_F) & \pi_3(q_z - 4k_F)^+ \\ \pi_3(q_z) & \pi_3(q_z - 4k_F)^+ & \pi_1(q_z - 2k_F) \end{pmatrix}$$

und

$$\underline{V}_{\underline{q}} = \begin{pmatrix} \tilde{V}_{\underline{q}} & 0 & 0 \\ 0 & \tilde{V}(q_x, q_y, q_z - 4k_F) & 0 \\ 0 & 0 & \tilde{V}(q_x, q_y, q_z - 2k_F) \end{pmatrix}$$

$\tilde{V}_{\underline{q}}$ ist in Glg (6.3), die $\pi_j(q_z)$ sind in Glg. (8.1) definiert.

Damit wird Glg. (9.2b) übersetzt:

$$\underline{\pi}^C = \underline{\pi} - \underline{\pi} \underline{V} \underline{\pi}^C \tag{9.3}$$

$$\underline{\pi}^C = [\underline{1} + \underline{\pi} \underline{V}]^{-1} \underline{\pi}$$

Die für die Phonorenormierung verwendeten Polarisationssterme $\pi^C(\underline{q} \rightleftharpoons \underline{q})$ und $\pi^C(\underline{q} \rightleftharpoons \underline{q}' = (q_z, q_y, q_z - 4k_F))$ sind das (1,1) - bzw. das (1,2)-Element der

+) Für $q_z > 4k_F$ sind diese Matrixelemente durch $\pi_3(q_z - 2k_F)$ zu ersetzen.

(symmetrischen) Matrix $\underline{\pi}^c$. Wir nennen sie analog den unabgeschirmten Größen (vgl. Glg. (8.1)) $\pi_1^c(\underline{q})$ bzw. $\pi_2^c(\underline{q})$. Die $\Pi^c(\underline{q}, \underline{q}')$ lassen sich genau wie die $\Pi(\underline{q}, \underline{q}')$ durch die $\pi_j^c(\underline{q})$ ausdrücken (s. Glg. (8.2)).

3 "Typen" der Elektron-Elektron-Wechselwirkung beeinflussen also die Phononfrequenzen bei $q_z = 2k_F$: \tilde{V}_{2k_F} , \tilde{V}_{-2k_F} , \tilde{V}_0 . Wir betrachten einmal nur den Einfluß des bei $\underline{q} = (0, 0, 2k_F)$ wichtigsten Typs $\tilde{V}_{\underline{q}-(0,0,2k_F)}$ auf die Polarisation.

Dann gilt als Spezialfall ($\tilde{V}_{\underline{q}} = \tilde{V}_{\underline{q}-(0,0,4k_F)} = 0$) von Glg. (9.3)

$$\underline{\pi}^c(\underline{q}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \frac{-\tilde{V}_{q_z-2k_F} \pi_3(q_z)}{1+\tilde{V}_{q_z-2k_F} \pi_1(q_z-2k_F)} \\ 0 & 1 & \frac{-\tilde{V}_{q_z-2k_F} \pi_3(q_z-4k_F)}{1+\tilde{V}_{q_z-2k_F} \pi_1(q_z-2k_F)} \\ 0 & 0 & \frac{1}{1+\tilde{V}_{q_z-2k_F} \pi_1(q_z-2k_F)} \end{pmatrix} \cdot \underline{\pi}(\underline{q}) \quad (9.4)$$

woraus

$$\pi_1^c(\underline{q}) = \pi_1(q_z) - \frac{\pi_3(q_z) \tilde{V}_{q_z-2k_F} \pi_3(q_z)}{1+\tilde{V}_{q_z-2k_F} \pi_1(q_z-2k_F)} \quad (9.5a)$$

$$\pi_2^c(\underline{q}) = \pi_2(q_z) - \frac{\pi_3(q_z) \tilde{V}_{q_z-2k_F} \pi_3(q_z-4k_F)}{1+\tilde{V}_{q_z-2k_F} \pi_1(q_z-2k_F)} \quad (9.5b)$$

folgt.

(Bei den letzten Gleichungen haben wir bei $\tilde{V}_{\underline{q}}$ wiederum der Übersichtlichkeit halber die Indices q_x, q_y weggelassen, da diese Impulskomponenten bei paralleler Phasenordnung erhalten sind.)

Wir stellen nun die Verbindung zu bekannten Resultaten /5/, /8/ her, indem wir die dort gemachten Einschränkungen ($\underline{q} \approx (0,0,2k_F)$) und Approximationen (lineare elektronische Dispersion, $\tilde{V}_{\underline{q} \approx 0} = \frac{4\pi e^2}{q^2}$) ebenfalls verwenden.

Mit den Polarisierungen $\pi_1^1, \pi_2^1, \pi_3^1$, Glg. (8.8)⁺⁾ ist für $\underline{q} \approx (0,0,2k_F)$

$$\begin{aligned} 1 + \tilde{V}_{\underline{q} \approx (0,0,2k_F)} \pi_1^1(q_z - 2k_F) &= 1 + \frac{2}{3} \frac{4\pi e^2 N(0) v_F^2}{4\Delta^2} \cdot \frac{(q_z - 2k_F)^2}{q_x^2 + q_y^2 + (q_z - 2k_F)^2} \\ &= 1 + \frac{2}{3} \frac{\omega_p^2}{4\Delta^2} \cos^2 \theta \end{aligned}$$

$$\pi_3^1(q_z) \tilde{V}_{\underline{q} \approx (0,0,2k_F)} \pi_3^1(q_z) = \frac{N(0)}{4} \frac{\omega_p^2}{4\Delta^2} \cos^2 \theta$$

Dabei ist $\omega_p^2 = \frac{4\pi n e^2}{m} = 4\pi e^2 N(0) v_F^2$ die Elektronplasmafrequenz.

$n = N_{\perp} \cdot \frac{2k_F}{\pi}$ ist die Elektronendichte, m die Elektronenmasse und $N(0) = N_{\perp} \frac{2}{\pi v_F}$ die Zustandsdichte an der Fermikante. Der Winkel θ ist in Abb. 11 a) definiert. Weiter gilt mit $x^2 = \frac{\omega_p^2}{4\Delta^2} \gg 1$

$$\pi_1^{cl}(\underline{q}) = -\frac{N(0)}{2} \left(\ln \frac{\Delta}{2\varepsilon_F} + \frac{1}{2} \right) - \frac{N(0)}{4} \frac{x^2 \cos^2 \theta}{1 + \frac{2}{3} x^2 \cos^2 \theta} \quad (9.6a)$$

$$\pi_2^{cl}(\underline{q}) = -\frac{N(0)}{4} \left(1 - \frac{x^2 \cos^2 \theta}{1 + \frac{2}{3} x^2 \cos^2 \theta} \right) \quad (9.6b)$$

und schließlich für $\underline{q} \rightarrow (0,0,2k_F)$ ($\lambda = \frac{g^2 N(0)}{2\Omega^2}$)

$$\begin{aligned} \omega_{\frac{1}{2}}^2(0,0,2k_F) &= \Omega^2 - g^2 (\pi_1^{cl} \pm \pi_2^{cl}) \\ &= \Omega^2 \left(1 + \lambda \ln \frac{\Delta}{2\varepsilon_F} \right) + \frac{\lambda}{2} \Omega^2 \left(1 + \frac{x^2 \cos^2 \theta}{1 + \frac{2}{3} x^2 \cos^2 \theta} \right) \\ &\quad \pm \frac{\lambda}{2} \Omega^2 \left(1 - \frac{x^2 \cos^2 \theta}{1 + \frac{2}{3} x^2 \cos^2 \theta} \right) \end{aligned}$$

⁺⁾ Analytische Berechnung von $\pi_3(q)$ für linearisierte Elektronendispersion ergibt für $|q_z| \approx 2k_F$ das Verhalten

$$\pi_3^1(q_z \approx 2k_F) = -N(0) \frac{v_F(|q_z| - 2k_F)}{4\Delta}$$

Mit der Gapgleichung (8.10) erhalten wir das Ergebnis:

$$\omega_1^2 = \lambda \Omega^2 \quad \text{"Amplitudenmode"} \quad (9.7a)$$

$$\omega_2^2 = \lambda \Omega^2 \frac{x^2 \cos^2 \theta}{1 + \frac{2}{3} x^2 \cos^2 \theta} = \begin{cases} \frac{3}{2} \lambda \Omega^2 & \theta = 0 \\ 0 & \theta = \pi/2 \end{cases} \quad \text{"Phasenmode"} \quad (9.7b)$$

Die θ -Abhängigkeit von ω_1 und ω_2 ist in Abb. 11b) dargestellt.

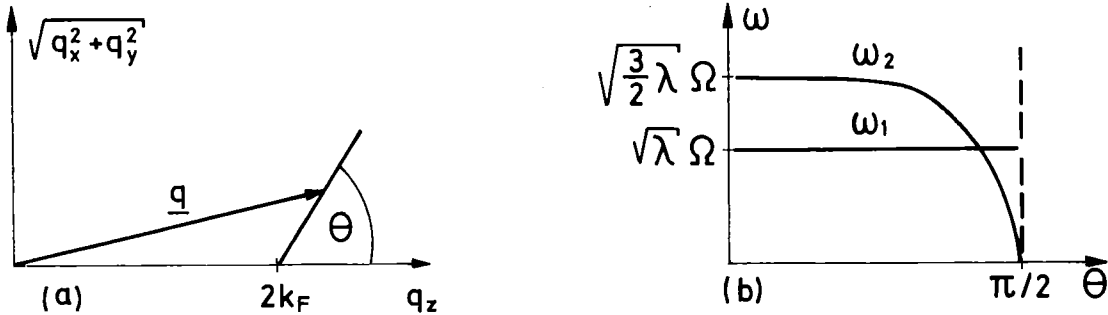


Abb. 11 Winkelabhängigkeit von Phasen- und Amplitudenmode

ω_2 wird in der Literatur für $\theta = 0$ oft (etwas irreführend) "longitudinale" Phasenmode $\omega_{L,P}$, für $\theta = \pi/2$ "transversale" Phasenmode $\omega_{T,P}$ genannt. Wir werden die Symbole $\omega_{L,P}$ und $\omega_{T,P}$ für diese beiden Grenzfälle ebenfalls verwenden. Alle Anregungen mit Polarisation parallel zur Kette haben jedoch bei $(0,0,2k_F)$ zumindest überwiegend longitudinalen Charakter.

Während die Grenzfrequenz der Amplitudenmode bei $\underline{q} = (0,0,2k_F)$ unabhängig von der Richtung ist, aus der wir uns diesem Punkt nähern, überrascht die ausgeprägte Richtungsabhängigkeit der Phasenmode-Frequenz (Abb. 11b)). Eine solche Winkelabhängigkeit findet sich auch bei der Elektronplasmafrequenz in quasi-eindimensionalen Systemen /21/. Tatsächlich läßt sich die Phasenmode als Plasmaschwingung der Überstruktur verstehen. Diese Anregung erzeugt durch Verschieben der Überstruktur kohärente Oberflächenladungen an den Kettenenden. Für $\underline{q} = (0,0,2k_F)$ ist die Ladungsdichte auf einer Oberfläche konstant, und die beiden Seiten besitzen verschiedene Vorzeichen. Der (in Glg. (9.6) berücksichtigte) weitreichende Anteil der Coulomb-Wechselwirkung führt nun zu einem "Überstrukturplasmon", dessen Frequenz sich wie folgt abschätzen läßt:

$$(\omega_P^{\text{ÜS}})^2 = 4\pi e^2 \frac{n^{\text{ÜS}}}{m^*} = \omega_P^2 \cdot \frac{n^{\text{ÜS}}}{n} \cdot \frac{m}{m^*}$$

Die Ladungsdichte $n^{\text{ÜS}}$ der Überstruktur ist etwa $\frac{1}{1000}$ der Gesamtladungsdichte, die effektive Masse m^* eines "Überstruktur-Teilchens", d.h. eines stark an das Phononsystem gekoppelten Elektrons, ist sehr groß gegenüber der freien Elektronenmasse m :

$$\frac{m^*}{m} \approx \frac{4\Delta^2}{\lambda\Omega^2} \approx \frac{40\,000}{40} \approx 1000 \quad /8/$$

(Daten für KCP). Die erwartete Frequenz

$$\omega_p^{\text{ÜS}} \approx \omega_p \cdot \frac{1}{1000}$$

der als "Überstrukturplasmon" interpretierten Phasenmode liegt also im richtigen Bereich (\approx meV). Sind q_x oder q_y von Null verschieden, werden die induzierten Oberflächenladungen nach Betrag und Vorzeichen moduliert. Die weitreichenden Anteile der Coulomb-Wechselwirkung heben sich über die Ketten gemittelt auf, und die Frequenz der Phasenmode wird (in dieser Näherung) zu Null. Dafür ist der Winkel θ (s. Abb. 11a)) und nicht der Winkel, den \underline{q} mit der Kettenrichtung bildet, maßgebend.

Trotz dieser Erklärung der Winkelabhängigkeit der Phasenmode ist das Auftreten verschiedener Grenzfrequenzen für $\underline{q} \rightarrow (0,0,2k_F)$ physikalisch widersprüchlich. Der Phasenmode ist wie jedem Phonon 1 Freiheitsgrad, also eine definierte Energie zugeordnet. Welches ist nun die "wirkliche" Frequenz und wie sind die anderen Frequenzen zwischen 0 und $\sqrt{\frac{3}{2}} \lambda \Omega$ zu interpretieren?

Das analoge Problem taucht in den optischen Phononzweigen der Ionenkristalle (z.B. NaCl) für $\underline{q} \rightarrow (0,0,0)$ auf. Dort unterscheiden sich bei vorgegebener Schwingungsrichtung \hat{e} (etwa $\hat{e} = (0,0,1)$) die Frequenzen des transversal optischen Phonons $\omega_{\text{TO}} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \omega(\epsilon, \epsilon, 0)$ von dem des longitudinal optischen Phonons $\omega_{\text{LO}} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \omega(0, 0, \epsilon)$. Auch dafür ist die Coulomb-Wechselwirkung zwischen den durch Ionenauslenkung entstandenen Oberflächenladungen verantwortlich, wie die Beziehung / 22/ $\omega_{\text{LO}}^2 = \omega_{\text{TO}}^2 + \Omega_p^2$ mit der Ionenplasmafrequenz Ω_p zeigt. ⁺⁾

⁺⁾ Die Analogie wird auch im Beitrag zur dielektrischen Funktion $\epsilon(\omega)$ deutlich. Symbolisiert $\epsilon(0)$ die dielektrische Funktion $\epsilon(\omega)$ für $\omega^2 \ll \omega_{\text{TO}}^2$ und $\epsilon(\infty)$ sie für $\omega^2 \gg \omega_{\text{LO}}^2$, so gilt, falls andere Beiträge zu $\epsilon(\omega)$ über diesen Bereich konstant sind, die Lyddane-Sachs-Teller-Relation / 22./

$$\frac{\epsilon(0)}{\epsilon(\infty)} = \frac{\omega_{\text{LO}}^2}{\omega_{\text{TO}}^2}$$

Diese Beziehung läßt sich (/ 5/, Anhang A) mit $\omega_{\text{LO}} \hat{=} \omega^-(\theta=0)$, $\omega_{\text{TO}} \hat{=} \omega^-(\theta=\pi/2)$ auch für den Beitrag der Phasenmode zu $\epsilon(\omega)$ aufstellen.

Die Frage nach der "richtigen" Phononfrequenz im Punkt $\underline{q} = (0,0,0)$ kann nur unter Berücksichtigung der Wechselwirkung der transversal optischen Phononen mit den Photonen des elektromagnetischen Feldes beantwortet werden.

In Abb. 12 ist das Ergebnis für einen Ionenkristall dargestellt /23/. Der Deutlichkeit halber vergleichen wir nicht LO- bzw. TO-Zweige mit festem \hat{e} und verschiedenem \underline{q} , sondern LO- und TO-Zweige mit festem \underline{q} ($\underline{q} = (0,0,1)$) und variablem \hat{e} . Für Kristalle wie NaCl ist dies äquivalent.

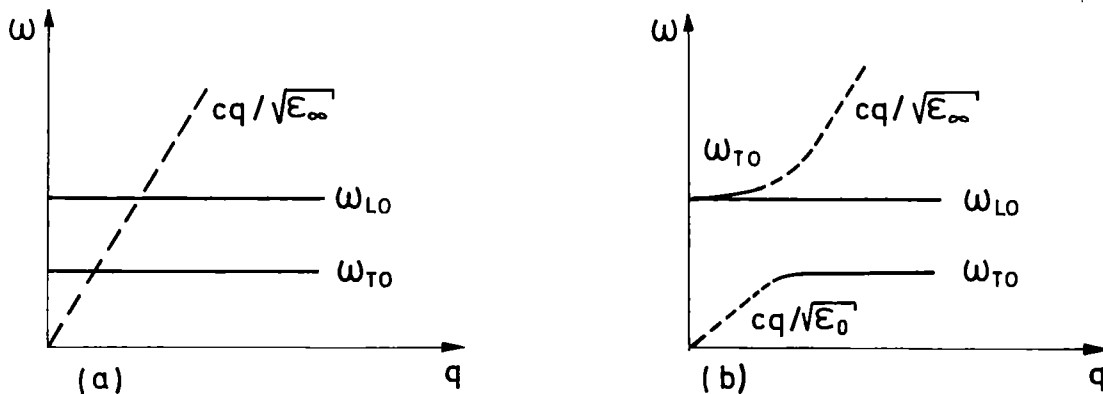


Abb. 12 Wechselwirkung von Licht mit transversal optischen Phononen

- a) Dispersion von Phononen und Photonen ohne Wechselwirkung
- b) Dispersion von Phononen und Photonen mit Wechselwirkung; durchgezogen: Anregung hat hauptsächlich mechanischen Charakter, gestrichelt: Anregung hat hauptsächlich elektromagnetischen Charakter (willkürliche Einheiten)

Durch die Phonon-Photon-Wechselwirkung entstehen aus dem TO-Zweig und dem elektromagnetischen Zweig zwei neue Zweige einer gemischten Anregung (Polaritonen). Diese Wechselwirkung ist wegen des steilen Anstiegs der Photonendispersion jedoch nur in einem Bereich $q < \frac{\bar{\omega}}{c} \approx \frac{10^{13} \text{ sec}^{-1}}{10^{18} \text{ \AA sec}^{-1}} = 10^{-5} \text{ \AA}^{-1}$ von Bedeutung. Für größeres q hat der obere Zweig nahezu rein elektromagnetischen Charakter ("Licht"), der untere Zweig ist das "alte" TO-Phonon. Dort hat die Retardierung ($c > 0$) keinen Einfluß. Für $q \rightarrow 0$ geht jedoch zunehmend mechanische Energie auf den oberen Zweig über. Für $q \approx 0$ ist dieser Zweig die Fortsetzung der TO-Phonondispersion: $\omega_{TO}(q=0)$ fällt mit $\omega_{LO}(q=0)$ zusammen, wie wir es wegen der in diesem Punkt ununterscheidbaren Schwingungstypen erwarten. In diesem Bereich ist die elektromagnetische Energie auf den unteren Zweig konzentriert. Auf unseren Fall lassen sich diese Überlegungen wie in der folgenden Abbildung dargestellt übertragen.

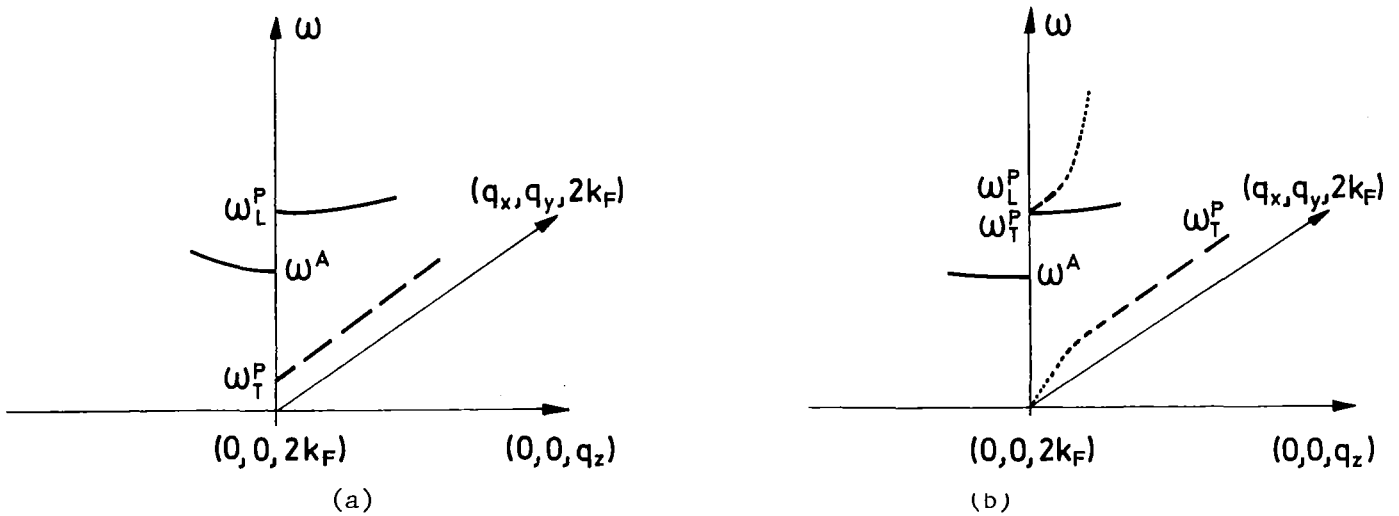


Abb. 13 Winkelabhängigkeit der Phasenmode bei $(0,0,2k_F)$

- a) ohne Berücksichtigung der Phonon-Photon-Wechselwirkung
- b) mit Berücksichtigung der Phonon-Photon-Wechselwirkung.

Es sind die Grenzfälle $\theta = 0$ (ω_L^P : durchgezogen) und $\theta = \frac{\pi}{2}$ (ω_T^P : gestrichelt für hauptsächlich phononartigen, gepunktet für elektromagnetischen Charakter) dargestellt. ω_T wurde ungleich Null angenommen (siehe Text). Außerdem ist die θ -unabhängige Amplitudenmode eingezeichnet.

Während in Abb. 13a) die Phasenmode bei $(0,0,2k_F)$ je nach Winkel θ (vgl. Abb. 11) alle Frequenzen zwischen ω_T^P und ω_L^P annimmt, ist durch Einbezug der Phonon-Photon-Wechselwirkung die Grenzfrequenz für $\underline{q} \rightarrow (0,0,2k_F)$ eindeutig. Da für $\underline{q} \rightarrow (0,0,2k_F)$ der obere Zweig der gemischten Phonon-Photon-Anregung phononartig ist, ist ω_L^P die gemeinsame Grenzfrequenz. In der Zeichnung ist ω_T^P der Deutlichkeit halber von Null verschieden eingezeichnet. Dies entspricht der Situation in realen Kristallen, in denen ω_T durch andere Anteile der Elektron-Elektron-Wechselwirkung als dem bisher verwendeten (s. folgende Seiten), durch Umklapp-Prozesse (siehe Abschnitt 10) oder Fehlstellen angehoben wird. Der Fall $\omega_T = 0$ geht jedoch stetig aus der dargestellten Situation hervor: am oberen Zweig ändert sich nichts, der untere Zweig geht nach 0. Der Bereich, in dem keine gemischten Anregungen möglich sind, erstreckt sich nun von $\omega_T^P = 0$ bis ω_L^P (vgl. / 5 /).

Trotz dieser prinzipiellen physikalischen Bedeutung der Phonon-Photon-Wechselwirkung wird sie im folgenden keine Rolle mehr spielen. Für die Interpretation eines Neutronenstreuexperimentes ist sie ohne Bedeutung, da der Bereich, in dem sie zu deutlichen Korrekturen führt, mit $|\underline{q} - (0,0,2k_F)| < 10^{-5} \text{ \AA}^{-1}$ wesentlich kleiner als die experimentell erreichte Auflösung ($> 10^{-2} \text{ \AA}^{-1}$) ist.

Der Beitrag der Phasenmode zur dielektrischen Funktion wurde von LRA und Schuster in der auf den letzten Seiten dargestellten Näherung (nur Anteil $q \approx 0$ der Elektron-Elektron-Wechselwirkung $\tilde{V}_{\underline{q}}$ zugelassen) berechnet. Das Resultat ist / 5/, /8/

$$\epsilon(q=0, \omega) = \epsilon_{\infty} \frac{\omega^2 - \omega_L^2}{\omega^2 - \omega_T^2 + i\delta} \quad (9.8a)$$

wobei ϵ_{∞} die dielektrische Funktion für $\omega^2 \gg \omega_L^2$ ist, und

$$\omega_L^2 = (\omega^-(\theta=0))^2 = \frac{3}{2} \lambda \Omega^2 \quad (9.8b)$$

$$\omega_T^2 = (\omega^-(\theta = \frac{\pi}{2}))^2 = 0 \quad \text{ist.}$$

Daraus folgt die erwähnte Lyddane-Sachs-Teller Relation (s.S. 49, Fußnote):

$$\frac{\epsilon(0)}{\epsilon(\infty)} = \frac{\omega_L^2}{\omega_T^2}$$

Außerdem gilt für die Leitfähigkeit $\sigma(\omega)$

$$\epsilon(\omega) = 1 + 4\pi i \frac{\sigma(\omega)}{\omega}$$

$$\text{Re } \sigma(\omega) = \frac{\omega}{4\pi} \text{Im } \epsilon(\omega) \sim (\delta(\omega - \omega_T) + \delta(\omega + \omega_T)) \quad (9.10)$$

$\omega_T = 0$ führt also zu unendlicher Leitfähigkeit, wie von Fröhlich auf anderem Weg gefordert. LRA folgerten aus der obigen Beziehung zwischen σ und ω_T , daß die Existenz einer $\omega = 0$ - Anregung ($\hat{=} \omega_T^P$) unabdingbar für den Fröhlich-Mechanismus sei /8/. Wie dieses Postulat zu interpretieren ist, werden wir am Ende dieses Kapitels erläutern.

Wir haben bisher die beiden anderen "Typen" der Elektron-Elektron-Wechselwirkung außeracht gelassen: $V_{\underline{q}}$ und $V_{\underline{q}^-(0,0,4k_F)}$. Ihr Einfluß auf die Phononendispersion bei $q_z = 2k_F$ ist weniger spektakulär als der betrachtete Typ $V_{\underline{q}^-(0,0,2k_F)}$. Sie führen aber zu einer weiteren Abschirmung (= Verringerung) der elektronischen Polarisation und damit zu einem Anheben der Phononfrequenzen. Insbesondere ist ω_T^P nun von Null verschieden: Allein Elektron-Elektron-Wechselwirkung⁺ führt

⁺) ohne Berücksichtigung von Umklapp-Prozessen, Kommensurabilität, Kristall-Störstellen u.ä. (oder auch Phonon-Photon-Wechselwirkung).

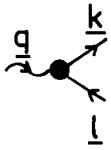
also zu einer endlichen Frequenz der Phasenmode, auch für $\theta = \frac{\pi}{2}$. Zwar heben sich die weitreichenden ($q \approx 0$)-Anteile der Coulomb-Wechselwirkung, die durch Wechselwirkung zwischen Oberflächenladungen zustande kamen, für $\underline{q} \neq (q_x = 0, q_y = 0, 2k_F)$ weg, wie Glg. (9.7b) zeigte. Dies gilt aber nicht für die Coulombkomponente $V_{\underline{q}}$, die durch eine Modulation der Ladungsdichte mit Wellenvektor \underline{q} im Innern des Kristalls auftritt. Diese Wechselwirkung zwischen den Elektronen ist für die endliche Frequenz auch der "transversalen" Phasenmode verantwortlich. Entsprechend werden die Frequenzen anderer Phononen durch "Einschalten" der Coulombwechselwirkung angehoben. ($V_{\underline{q}}(0,0,4k_F)$ hat fast keinen Einfluß auf die Phononendispersion.)

Der endliche Wert von ω_T darf aber kein "Pinning" der Ladungsdichtewelle in dem Sinne bedeuten, daß die Fröhlich-Supraleitung zerstört wäre, wie es Gleichung (9.10) zunächst vermuten läßt. Das würde nämlich angesichts des nicht-dissipativen Charakters der Coulomb-Wechselwirkung physikalisch widersprüchlich sein. ⁺ Wir haben deshalb mit unserer Methode die dielektrische Funktion ϵ unter Einbeziehung aller 3 Typen der Coulomb-Wechselwirkung neu berechnet (Anhang A). Die Dielektrizitätsfunktion wird dann zur Matrix mit Komponenten $\epsilon(\underline{q}, \underline{q}', \omega)$, wobei sich q_z und q'_z um Vielfache von $2k_F$ unterscheiden können. Es zeigt sich aber, daß das Matrixelement $\epsilon(\underline{q} \approx 0, \underline{q}' \approx 0, \omega)$ sich weiterhin in der Form $\epsilon(0,0,\omega) = \epsilon_\infty \frac{\omega^2 - \omega_L^2}{\omega^2 - \omega_T^2}$ schreiben läßt, wobei ω_T die nicht Coulomb-renormierte Phasenmodedefrequenz und ω_L die nur bezüglich $V_{\underline{q}} \approx 0$ renormierte Phasenmodedefrequenz ist, deren Wert in Glg. (9.8b) gegeben ist. $\epsilon(q = 0, q = 0, \omega)$ und damit die Leitfähigkeitskomponente $\sigma(q = 0, q' = 0, \omega)$ ist also nicht durch die vollständig renormierten Phononfrequenzen, sondern durch diese Größen bestimmt. Das Postulat von LRA muß als Forderung verstanden werden, daß die Phasenmode ohne Berücksichtigung der Elektron-Elektron-Wechselwirkung die Frequenz 0 haben muß, um Fröhlich-Supraleitung zu ermöglichen.

⁺ Die Coulomb-Wechselwirkung hat auf die Impulsauswahlregeln keinen Einfluß. Damit bleibt dem Elektron-Phonon-System ein ihm aufgeprägter Impuls ohne Umklapp-Prozesse erhalten.

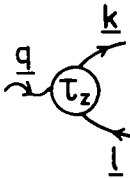
10. Umklapp-Prozesse

Bei den bisherigen Rechnungen ließen wir die Gitterstruktur innerhalb der einzelnen Ketten außer acht. Diese führt zu Umklapp-Prozessen bei der Elektron-Phonon-Kopplung, wie wir im Abschnitt 5 sahen. Neben dem Vertex



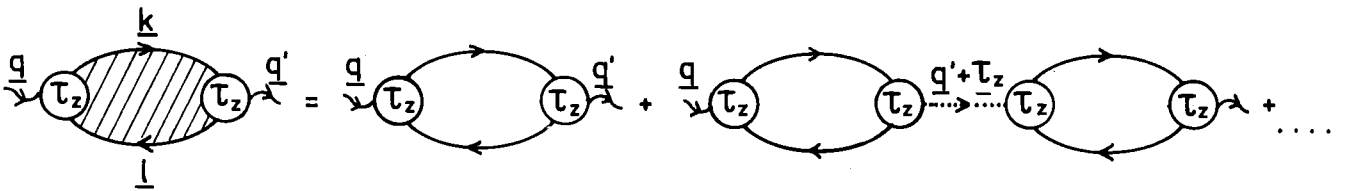
bestimmt durch $\langle \underline{k} | e^{\frac{iqr}{-z}} | \underline{1} \rangle$,

ist nun über alle Vertices

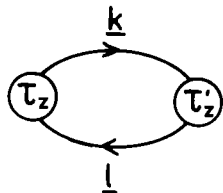


bestimmt durch $\langle \underline{k} | e^{\frac{i(q+\tau_z)r}{-z}} | \underline{1} \rangle$
 $\tau_z = (0, 0, \tau_z)$

zu summieren. Es treten jetzt also auch (Coulomb-renormierte) Polarisationsgraphen des Typs



auf $(q'_z \in \{q_z, q_z - 4k_F \text{sign} q_z, q_z - 2k_F \text{sign} q_z\})$. Dabei enthalten alle Vertices und Coulomb-Wechselwirkungssteile dasselbe τ_z , da an den Vertices der Elektron-Elektron-Wechselwirkung keine Umklapp-Prozesse auftreten (Abschnitt 6) und Graphen des Typs



für $\tau'_z \neq \tau_z$ keine Beiträge liefern. Für den von uns betrachteten Fall der Inkommensurabilität von $2k_F$ und τ_z , d.h. $n2k_F \neq m\tau_z, (m, n \in \mathbb{Z})$ ist nämlich

$$\langle \underline{k} | e^{\frac{i(q+\tau_z)r}{-z}} | \underline{1} \rangle \langle \underline{1} | e^{-\frac{i(q'+\tau'_z)r}{-z}} | \underline{k} \rangle \sim \delta_{\tau_z, \tau'_z}$$

Da wir nur 1 Atom/EZ haben, brauchen wir auch keine Kopplung verschiedener Phononenzweige durch Umklapp-Prozesse zu berücksichtigen und erhalten als Dysongleichung für den Phononenpropagator

$$\begin{array}{c} \underline{q} \quad \underline{q}' \\ \text{~~~~} \end{array} = \delta_{\underline{q}, \underline{q}'} \begin{array}{c} \underline{q} \\ \text{~~~~} \end{array} + \begin{array}{c} \underline{q} \\ \text{~~~~} \end{array} \bullet \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \bullet \begin{array}{c} \underline{q}'' \quad \underline{q}' \\ \text{~~~~} \end{array} \quad (10.1a)$$

mit

$$\begin{array}{c} \underline{q} \\ \text{~~~~} \end{array} \bullet \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \bullet \begin{array}{c} \underline{q}' \\ \text{~~~~} \end{array} = \sum_{\underline{\tau}_z} \begin{array}{c} \underline{q} \\ \text{~~~~} \end{array} \bullet \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \bullet \begin{array}{c} \underline{q}' \\ \text{~~~~} \end{array} \quad (10.1b)$$

$$= -i \Pi^u(\underline{q}, \underline{q}')$$

$\Pi^u(\underline{q}, \underline{q}')$ läßt sich durch die π_j^c (S. 44f) ausdrücken ($q_z > 0$; $\underline{q}' = \underline{q} - (0, 0, 4k_F)$):

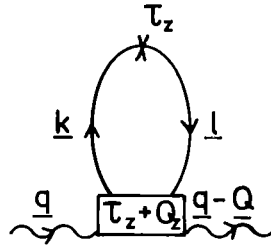
$$\Pi^u(\underline{q}, \underline{q}) = \sum_{\underline{\tau}_z} (-i)^2 |g^{\underline{q}+\underline{\tau}_z}|^2 \pi_1^c(\underline{q}+\underline{\tau}_z) = \sum_{\underline{\tau}_z} \Pi^c(\underline{q}+\underline{\tau}_z, \underline{q}+\underline{\tau}_z) \quad (10.2a)$$

$$\begin{aligned} \Pi^u(\underline{q}, \underline{q}') &= \sum_{\underline{\tau}_z} (-i)^2 g^{\underline{q}+\underline{\tau}_z} (g^{\underline{q}'+\underline{\tau}_z})^* \left[\theta(q_z + \tau_z) \pi_2^c(\underline{q}+\underline{\tau}_z) + \theta(-(q_z + \tau_z)) \pi_2^c(\underline{q}'+\underline{\tau}_z) \right] \\ &= \sum_{\underline{\tau}_z} \theta(q_z + \tau_z) \Pi^c(\underline{q}+\underline{\tau}_z, \underline{q}'+\underline{\tau}_z) + \theta(-(q_z + \tau_z)) \Pi^c(\underline{q}+\underline{\tau}_z, \underline{q}+\underline{\tau}_z) \end{aligned} \quad (10.2b)$$

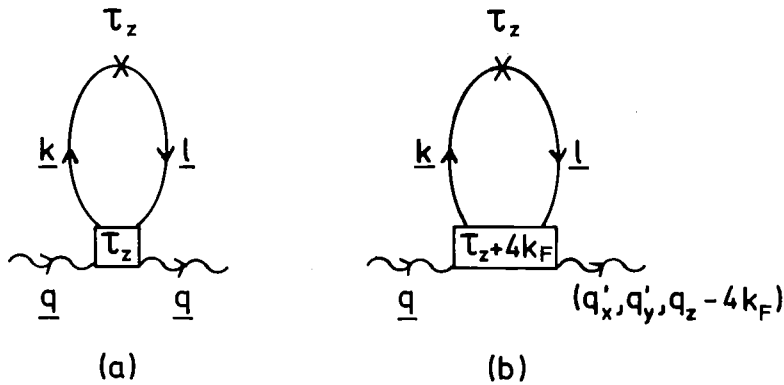
Die Unterscheidung der Fälle $q_z + \tau_z \gtrless 0$ soll erreichen, daß π_2^c auch für $q_z + \tau_z < 0$ die Kopplung $\underline{q} + \underline{\tau}_z \iff \underline{q} - (0, 0, 4k_F) + \underline{\tau}_z$ beschreibt.

Damit sind jedoch noch nicht alle Polarisationsanteile berücksichtigt, die zur Beschreibung von Umklapp-Prozessen wichtig sind. Es fehlen Terme, die durch Kombination von U_0^u , dem noch nicht erfaßten Teil des statischen Gitterpotentials (S. 9, S. 23), und 2-Phononen-Termen (S. 22) entstehen.

Das sind Graphen des Typs



Die z-Impulsauswahlregeln sind bestimmt durch: $\langle 1_z | e^{i\tau_z z} | k_z \rangle \langle k_z | e^{i(Q_z + \tau_z)z} | 1_z \rangle$ und deswegen gleich Null, falls $Q_z \notin (0, \pm 2k_F, \pm 4k_F)$ ist. Wie seither werden nur die Terme $Q_z = 0$ und $Q_z = 4k_F \text{ sign} q_z$ verwendet. Das bedeutet die beiden Feynman-Graphen:



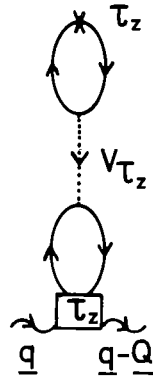
Diese beiden Graphen lassen sich auf π_1 und π_2 (S. 35) zurückführen. Mit Glg. (5.17) und (5.20) für die Vertices ($\phi_{R\perp} \equiv 0$) entspricht

$$\begin{aligned}
 \text{(a)} &\hat{=} \sum_{\tau_z \neq 0} 2 \cdot (-i)^2 \left(-\frac{\Omega^2}{2}\right) \epsilon_{\parallel} \tau_z^2 \tilde{u}_{0, \tau_z}^2 \pi_1(\tau_z) \\
 &= \sum_{\tau_z \neq 0} |g^{\tau_z} z|^2 \pi_1(\tau_z) = - \sum_{\tau_z \neq 0} \Pi(\tau_z, \tau_z) \quad (10.3a)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \text{(b)} &\hat{=} \sum_{\tau_z \neq 0} 2(-i)^2 \left(-\frac{\Omega^2}{2}\right) \epsilon_{\parallel} (\tau_z + 4k_F)^2 \tilde{u}_{0, \tau_z + 4k_F} \tilde{u}_{0, \tau_z} \left[\theta(\tau_z) \pi_2(\tau_z + (0, 0, 4k_F)) \right. \\
 &\quad \left. + \theta(-\tau_z) \pi_2(\tau_z) \right] \\
 &= \sum_{\tau_z \neq 0} g^{\tau_z} z (g^{\tau_z} z + (0, 0, 4k_F)) * \frac{\tau_z + 4k_F}{\tau_z} \left[\theta(\tau_z) \pi_2(\tau_z + (0, 0, 4k_F)) + \theta(-\tau_z) \pi_2(\tau_z) \right] \\
 &= \sum_{\tau_z \neq 0} -\left(1 - \frac{4k_F}{\tau_z}\right) \left[\theta(\tau_z) \Pi(\tau_z, \tau_z - (0, 0, 4k_F)) + \theta(-\tau_z) \Pi(\tau_z - (0, 0, 4k_F), \tau_z) \right] \quad (10.3b)
 \end{aligned}$$

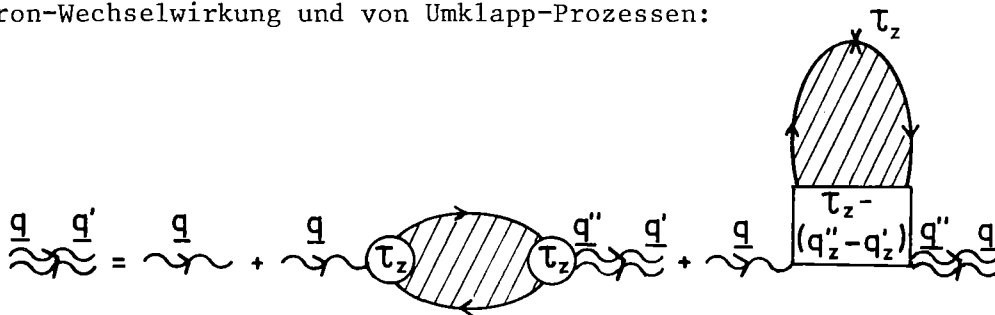
(Beim Übergang zur letzten Zeile haben wir τ_z durch $-\tau_z$ substituiert.) Der Faktor 2 auf der rechten Seite von (a) und (b) tritt deswegen auf, weil für vorgegebenes \underline{q} $\Phi_{\underline{q}} \Phi_{\underline{q}}^+ = \Phi_{\underline{p}} \Phi_{\underline{p}}^+$ für die beiden Werte $\underline{p} = \pm \underline{q}$ ist und in U_0^u damit zweimal vorkommt. Ebenso ist $\Phi_{\underline{q}} \Phi_{\underline{q} - (0, 0, 4k_F)}^+ = \Phi_{\underline{p}} \Phi_{\underline{p} - (0, 0, 4k_F)}^+$ für $\underline{p} = \underline{q}$ und $\underline{p} = -(\underline{q} - (0, 0, 4k_F))$.

Die Coulomb-Renormierung dieser Größen, d.h. Mitnahme von Termen wie



erfolgt wie die der bereits betrachteten Diagramme, da sich lediglich die vertex-abhängigen separablen Vorfaktoren an den Endpunkten (\square und x) unterscheiden. In den Glg. (10.3a) und (10.3b) ist also π durch π^C bzw. Π durch Π^C zu ersetzen.

Damit ist die Phononenrenormierung abgeschlossen. Die Matrix-Dysongleichung für den Phononenpropagator lautet unter Berücksichtigung der Elektron-Elektron-Wechselwirkung und von Umklapp-Prozessen:



Die Ergebnisse für renormierte Frequenzen und Operatoren, die aus der Diagonalisierung dieser Matrixgleichung folgen, sind in Abschnitt 7, Glg. (7.5) und (7.6) angegeben. $\Pi(\underline{q}, \underline{q})$ und $\Pi(\underline{q}, \underline{q}')$ sind jetzt wie folgt zu substituieren ($q_z > 0$; $\underline{q}' = \underline{q} - (0, 0, 4k_F)$)

$$\Pi(\underline{q}, \underline{q}) \rightarrow \Pi^C(\underline{q}, \underline{q}) + \sum_{\tau_z \neq 0} (\Pi^C(\underline{q} + \tau_z, \underline{q} + \tau_z) - \Pi^C(\tau_z, \tau_z)) \quad (10.4a)$$

$$\begin{aligned} \Pi(\underline{q}, \underline{q}') \rightarrow & \Pi^C(\underline{q}, \underline{q}') + \sum_{\tau_z \neq 0} \left[\theta(q_z + \tau_z) \Pi^C(\underline{q} + \tau_z, \underline{q}' + \tau_z) + \theta(-(q_z + \tau_z)) \Pi^C(\underline{q}' + \tau_z, \underline{q} + \tau_z) \right] \\ & - \sum_{\tau_z \neq 0} \left(1 - \frac{4k_F}{\tau_z} \right) \left[\theta(\tau_z) \Pi^C(\tau_z, \tau_z - (0, 0, 4k_F)) + \theta(-\tau_z) \Pi^C(\tau_z - (0, 0, 4k_F), \tau_z) \right] \end{aligned} \quad (10.4b)$$

Wie wir sehen, heben sich für $\underline{q} \rightarrow 0$ die Umklapp-Terme bei den normalen Termen vollständig, bei den anomalen Termen bis auf

$$\sum_{\tau_z > 0} \frac{4k_F}{\tau_z} (\Pi^C(\tau_z, \tau_z - (0, 0, 4k_F)) - \Pi^C(\tau_z + (0, 0, 4k_F), \tau_z)) \text{ weg.}$$

Diese Kompensation ist aus der Phonondispersion für Gitter ohne Überstruktur bekannt / 24 /: Für große Wellenlängen verschwindet der Unterschied zwischen

Gitter und Kontinuumsmodell. (Die nicht vollständige Kompensation bei den anomalen Termen beruht darauf, daß wir nur die für die $2k_F$ -Anomalie wichtigen anomalen Prozesse berücksichtigt haben.)

Für $q \neq 0$ (oder $q \neq \tau$) ist der Einfluß der Umklapp-Prozesse auf die Phonondispersion jedoch wichtig. Insbesondere können Umklapp-Prozesse wie die Elektron-Elektron-Wechselwirkung die "longitudinale" und "transversale" Phasenmode anheben. Außerdem fällt jetzt, da das Gitter Kristallimpuls aufnehmen kann, das Kriterium von Fröhlich weg, daß die Phasenmode mit unendlicher Gleichstromleitfähigkeit verbunden sei (s. Einleitung). Das bedeutet aber, daß die dielektrische Funktion ihre Polstelle bei Frequenzen größer als Null haben kann, und wir können so die in der optischen Reflektivität von KCP im fernen Infrarot beobachteten und der Phasenmode zugeschriebenen Strukturen / 17 / im Rahmen unseres Modells interpretieren, ohne Kristalldefekte oder Nicht-Ketten-Atome für die beobachteten von Null verschiedenen Frequenzen verantwortlich zu machen.

Von Abschnitt 7 bis zu diesem Abschnitt haben wir untersucht, wie die Renormierung des Phononenpropagators und damit die Dispersion für ein System phasenparallel geordneter Peierlsketten aussieht. Wir ermittelten den Einfluß der Elektron-Elektron-Wechselwirkung und von Umklapp-Prozessen auf die $2k_F$ -Phononanomalie und damit verbundene Phänomene wie Fröhlich-Supraleitung und Infrarot-Aktivität der Phasenmode. Bevor wir im nächsten Abschnitt untersuchen, welche Bedeutung die Korrelation der Überstrukturphasen der verschiedenen Ketten auf diese Eigenschaften hat, soll geprüft werden, ob unsere Theorie qualitativ in der Lage ist, die gemessene $2k_F$ -Anomalie in der Phonondispersion von KCP (Abb. 3) wiederzugeben.

KCP ist für $T < 100$ K (allerdings unvollständig) phasen-antiparallel geordnet, die in unserem Modell bei $(0,0,2k_F)$ auftretenden Effekte erwarten wir dort analog bei $(\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}, 2k_F)$ (s. folgender Abschnitt). Für die zur Berechnung der Dispersion benötigten Materialkonstanten (Gitterkonstanten, k_F , ϵ_F , Δ , ϵ_{\perp} , ϵ_{\parallel}) verwenden wir die bereits angegebenen Meßwerte von KCP. Die in der Elektron-Elektron- und Elektron-Ion-Wechselwirkung auftretenden Matrixelemente \tilde{u}_q und \tilde{V}_q (S. 20 und S. 24) setzen wir jedoch in einer einfacheren, numerisch leichter zu handhabenden Form an: Der Effekt der Lokalisierung der Elektronen in die Nähe der Ketten beruht in einem Vergrößern der Matrixelemente gegenüber denen für freie Elektronen. Dies berücksichtigen wir, in dem wir das Matrixelement der Elektron-Elektron-Wechselwirkung freier Elektronen in der Form

$$\underline{V}_q = \frac{4\pi e^2}{\epsilon_{\parallel} q_z^2 + \epsilon_{\perp} (q_x^2 + q_y^2)} \frac{1}{\alpha F \cdot L}$$

durch α parametrisieren (L: Länge (= 1), F: Querschnitt des Kristalls). α kann also als Maß für die effektive Fläche, den Teil der Fläche senkrecht zu den Ketten, der den Elektronen zur Verfügung steht, gedeutet werden. Die Elektron-Phonon-Kopplungskonstante g^q ist in diesem vereinfachten Modell dann durch V_q und Ω bestimmt:

$$g^q = i \Omega \sqrt{\epsilon_{\parallel}} \frac{V_q}{V_c} \cos q R_c$$

Diese beiden Gleichungen enthalten nun auch alle Parameter, die nicht durch die Daten von KCP festgelegt sind:

Ω : die Ionenplasmafrequenz

R_c : den Ashcroftradius des Elektron-Ion-Potentials

α : ein Maß für die Lokalisierung der Elektronen

Mit den Werten

$$\Omega = 30 \text{ meV}, \quad R_c = 0.36 \text{ \AA}, \quad \alpha = 0.1$$

resultiert für KCP der in Abb. 14 dargestellte Verlauf der Phonondispersion im Bereich der Anomalie

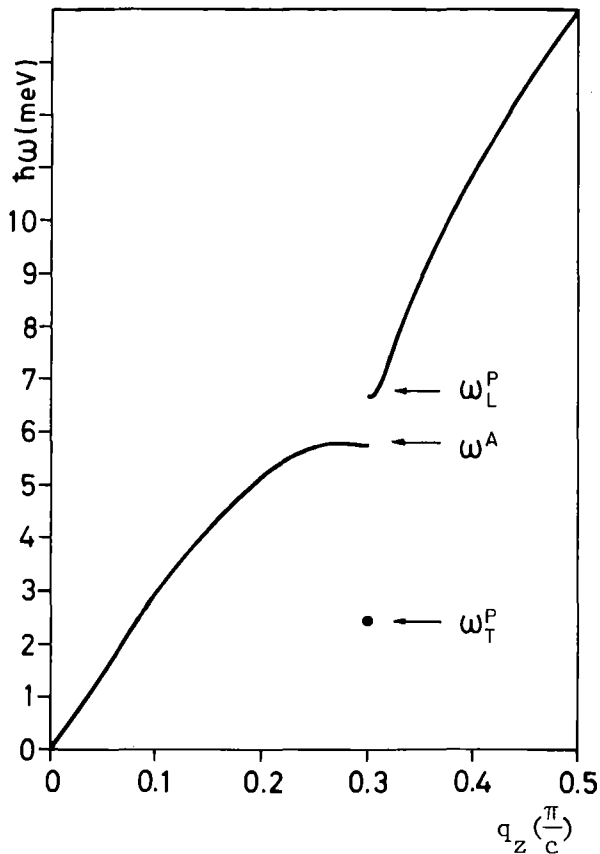


Abb. 14 Numerisch berechnete Dispersion unter Annahme paralleler Überstrukturphasen. Es sind die Daten von KCP und die im Text angegebenen Parameter verwendet.

Insbesondere resultiert für Phasen- und Amplitudenmode (s. Abb. 13, S. 51)

$$\omega^A = 5.7 \text{ meV}, \quad \omega_T^P = 2.5 \text{ meV}, \quad \omega_L^P = 6.6 \text{ meV}.$$

Dieser Verlauf der Dispersion ist, wie wir in Kap. III sehen werden, geeignet, die Intensitätsverteilung der im Anomaliebereich inelastisch gestreuten Neutronen (Abb. 2, S. 5) befriedigend wiederzugeben. Die Parameterwerte liegen in einem "vernünftigen" Bereich: Schreibt man etwa für die Ionenplasmafrequenz $\Omega = \left(\frac{4 \pi N e^2}{\epsilon_{11} M}\right)^{1/2}$ mit der Dichte N der Pt-Atome und der Masse M für die $\text{Pt}(\text{CN})_4$ -Komplexe, ^{+) erhalten man $\Omega \approx 25 \text{ meV}$. $\alpha = 0.1$ entspricht einem Aufenthaltsbereich um die Kette mit Radius von ca. 1.8 \AA . Eine weitere Interpretation dieser Parameter ginge jedoch (z.B. angesichts des einfachen Ansatzes für die Elektron-Ion-Kopplung) zu weit.}

11. Einfluß der Überstruktur-Phasenkorrelation auf die Phononendispersion

Wir gingen bisher davon aus, daß die Überstrukturen der einzelnen Ketten perfekt parallel phasenkorreliert wären. Hier soll untersucht werden, wie sich andere Phasenkorrelationen auswirken. Wir erwarten vor allem für die anomalen Graphen Veränderungen, da sie erst durch die Überstruktur hervorgerufen werden. Dagegen werden die normalen Beiträge weitgehend unbeeinflusst bleiben.

Wir nehmen zunächst eine perfekte Phasenordnung an, variieren lediglich die relative Phase ϕ der Peierls-Überstruktur \underline{R}^P (s.S. 8) von Kette zu Kette, d.h.

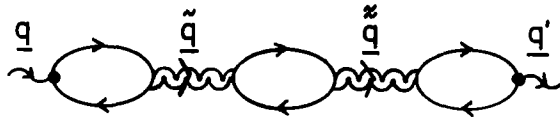
$$\begin{aligned} \phi_{\underline{R}_x \underline{R}_y} &= (Q_x, Q_y) \cdot (R_x^0, R_y^0), & \text{also} \\ \underline{R}^P &= (0, 0, c\delta \sin Q \underline{R}^0) \quad \text{mit } Q = (Q_x, Q_y, 2k_F). \end{aligned}$$


(Für antiparallele Anordnung wäre etwa $Q = (\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}, 2k_F)$.)

^{+) Aus Untersuchungen des elastischen Strukturfaktors schließt man, daß die (CN)-Komplexe in KCP starr an die Pt-Atome gebunden sind /25/.}

Das hat für die anomalen Polarisationssterme zur Folge, daß sie nicht mehr Wellenvektoren \underline{q} und $\underline{q}' = \underline{q} + (0, 0, n2k_F)$, $n = \pm 1, \pm 2$, koppeln, sondern $\underline{q}' = \underline{q} + (Q_x, Q_y, n2k_F)$. Wir sahen dies bereits an mehreren Stellen (S. 20, S. 36). Insbesondere erwarten wir für $Q = (\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}, 2k_F)$ das Phänomen der starken Richtungsabhängigkeit der Phasenmode (s.S. 48) nicht mehr bei $\underline{q} = (0, 0, 2k_F)$, sondern jetzt bei $\underline{q} = (\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}, 2k_F)$, da nun dieses Phonon an den weitreichenden Teil der Coulomb-Wechselwirkung angekoppelt. Perfekte Ordnung mit $(Q_x, Q_y) \neq (0, 0)$ bringt jedoch nichts prinzipiell Neues.

Wie sieht aber der andere Grenzfall vollkommen statistischer Verteilung der Überstruktur-Phasen aus? Um die Phononendispersion in diesem Fall zu erhalten, muß bei der Berechnung des Phononpropagators noch eine zusätzliche Mittelung über alle Phasenverteilungen mit geeigneter Wichtung durchgeführt werden. Dazu betrachten wir einen typischen Summanden aus der störungstheoretischen Entwicklung des Phononpropagators:



 kann sowohl die Elektron-Elektron-Wechselwirkung als auch den Phononpropagator mit Vertices $|g|^2$ darstellen.

Bis auf (in diesem Zusammenhang unwichtige) Vorzeichen ist dieser Graph G

$$G(\underline{q}, \underline{q}') \sim \sum_{\tilde{q}, \tilde{q}'} g^{\underline{q}} \cdot H(\underline{q}-\tilde{q}) \pi(q_z, \tilde{q}_z) \cdot W(\tilde{q}) \cdot H(\tilde{q}-\tilde{q}') \pi(\tilde{q}_z, \tilde{q}'_z) \cdot W(\tilde{q}') \cdot H(\tilde{q}'-\underline{q}') \pi(\tilde{q}'_z, q'_z) \cdot (g^{\underline{q}'})^* \quad (11.1)$$

wobei hier $\pi(q_z, \tilde{q}_z) = 2N_{\perp} \sum_{k_z, l_z} \frac{f_{k_z} - f_{l_z}}{E_{l_z} - E_{k_z}} \langle k_z | e^{iq_z z} | l_z \rangle \langle l_z | e^{iq_z z} | k_z \rangle$

bedeutet (vgl. S. 35). $W(\tilde{q})$ kann entweder $V_{\underline{q}}$ (Elektron-Elektron-Wechselwirkung, S. 24) oder $|g^{\underline{q}}|^2 \frac{1}{\omega^2 - \Omega^2}$ (Phonon mit Elektron-Phonon-Vertex, S. 21) sein, und

$$H(\underline{q}-\underline{q}') = \frac{1}{N_{\perp}} \sum_{R_{\perp}} e^{i(q_{\perp}-q'_{\perp})R_{\perp}} e^{i \frac{q'_z - q_z}{2k_F} \phi_{R_{\perp}}}$$

Wir mittelnG über alle Phasenkonfigurationen und erhalten

$$\langle G(\underline{q}, \underline{q}') \rangle \sim \sum_{\underline{\tilde{q}}, \underline{\tilde{q}'}} g^{\underline{q}} \pi(q_z, \tilde{q}_z) W(\underline{\tilde{q}}) \pi(\tilde{q}_z, \tilde{q}'_z) W(\underline{\tilde{q}'}) \pi(\tilde{q}'_z, q'_z) (g^{\underline{q}'})^* \quad (11.2)$$

$$\cdot \langle H(\underline{q}-\underline{\tilde{q}}) H(\underline{\tilde{q}}-\underline{\tilde{q}'}') H(\underline{\tilde{q}'}'-\underline{q}') \rangle$$

da nur die H phasenabhängig sind. Weiter ist

$$\begin{aligned} & \langle H(\underline{q}-\underline{\tilde{q}}) H(\underline{\tilde{q}}-\underline{\tilde{q}'}) H(\underline{\tilde{q}'}'-\underline{q}') \rangle \cdot N_{\perp}^3 \\ &= \langle \sum_{\underline{R}_{\perp}} e^{i(q_{\perp}-\tilde{q}_{\perp})R_{\perp}} e^{i\frac{\tilde{q}_z-q_z}{2k_F} \phi_{R_{\perp}}} \sum_{\underline{\tilde{R}}_{\perp}} e^{i(\tilde{q}_{\perp}-\tilde{q}'_{\perp})\tilde{R}_{\perp}} e^{i\frac{\tilde{q}_z-\tilde{q}'_z}{2k_F} \phi_{\tilde{R}_{\perp}}} \sum_{\underline{\tilde{R}}'_{\perp}} e^{i(\tilde{q}'_{\perp}-q'_{\perp})\tilde{R}'_{\perp}} e^{i\frac{q'_z-\tilde{q}'_z}{2k_F} \phi_{\tilde{R}'_{\perp}}} \rangle \\ &= \sum_{\underline{R}_{\perp}} \sum_{\underline{\tilde{R}}_{\perp}} \sum_{\underline{\tilde{R}}'_{\perp}} e^{i(q_{\perp}-\tilde{q}_{\perp})R_{\perp}} e^{i(\tilde{q}_{\perp}-\tilde{q}'_{\perp})\tilde{R}_{\perp}} e^{i(\tilde{q}'_{\perp}-q'_{\perp})\tilde{R}'_{\perp}} \langle e^{i\alpha\phi_{R_{\perp}}} e^{i\beta\phi_{\tilde{R}_{\perp}}} e^{i\gamma\phi_{\tilde{R}'_{\perp}}} \rangle \quad (11.3) \end{aligned}$$

mit $\alpha = \frac{\tilde{q}_z - q_z}{2k_F}$, $\beta = \frac{\tilde{q}_z - \tilde{q}'_z}{2k_F}$, $\gamma = \frac{q'_z - \tilde{q}'_z}{2k_F}$

$\alpha, \beta, \gamma \in \mathbb{Z}$, $\alpha + \beta + \gamma = \frac{q'_z - q_z}{2k_F} \in \mathbb{Z}$

Die Mittelung über die Phasen $\phi_{R_{\perp}}$ führen wir nun so aus, daß wir eine Wahrscheinlichkeit $P_{\phi}(R_{\perp})$ dafür definieren, daß $\phi_{R_{\perp}} = \phi_{R_{\perp}=(0,0)} + \phi$ ist, also von der Phase einer Referenzkette $\bar{R}_{\perp} = (0,0)$, die wir im folgenden gleich Null setzen, um ϕ abweicht.⁺)

Mit der Definition

$$P_{\phi}(R_{\perp}) = \frac{1}{\sqrt{\pi} \sigma R_{\perp}} e^{-\frac{\phi^2}{\sigma^2 R_{\perp}^2}} \quad (11.4)$$

bedeutet

$$\sigma \rightarrow 0 : \text{perfekte Korrelation} : P_{\phi} \rightarrow \begin{cases} 0 & \text{für } \phi \neq 0 \\ \infty & \text{für } \phi = 0 \end{cases}$$

$$\sigma \rightarrow \infty : \text{keinerlei Korrelation} : P_{\phi} = (\sqrt{\pi} \sigma R_{\perp})^{-1} \text{ wird phasenunabhängig.}$$

⁺) Falls die $\phi_{R_{\perp}}$ nicht um relative Phasen 0, d.h. parallele Ordnung, sondern um $\phi_{R_{\perp}} = Q_{\perp} \cdot \bar{R}_{\perp}$ verteilt sind, so separieren wir die entsprechenden Faktoren ($\exp \{-i\alpha Q_{\perp} \cdot R_{\perp}\}$ usw. aus $\langle \dots \rangle$ ab und fügen sie zu den zugehörigen Termen ($\exp \{i(q_{\perp}-\tilde{q}_{\perp}) R_{\perp}\}$ usw.) hinzu. Im folgenden sollen mit $\phi_{R_{\perp}}$ nur die einer Wahrscheinlichkeitsverteilung folgenden, statistischen Anteile der Überstrukturphase bezeichnet werden.

Dann ist

$$\langle e^{i\alpha\phi_{R_{\perp}}} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d\phi P_{\phi}(R_{\perp}) e^{i\alpha\phi} = e^{-\frac{\sigma^2}{4} \alpha^2 R_{\perp}^2}$$

Die Korrelation verschwindet mit wachsendem Abstand von der Referenzkette. Lediglich im Grenzfall $\sigma = 0$ (perfekte Ordnung) und $\sigma = \infty$ (vollkommen statistische Verteilung) ist diese Korrelation ortsunabhängig.

Dasselbe gilt für

$$\langle e^{i\alpha\phi_{R_{\perp}}} e^{i\beta\phi_{R_{\perp}}} e^{i\gamma\phi_{\tilde{R}_{\perp}}} \rangle = e^{-\frac{\sigma^2}{4} \alpha^2 R_{\perp}^2} e^{-\frac{\sigma^2}{4} \beta^2 R_{\perp}^2} e^{-\frac{\sigma^2}{4} \gamma^2 \tilde{R}_{\perp}^2} \quad (11.5)$$

$$= \begin{cases} 0 & \text{für } \sigma = \infty \\ 1 & \text{für } \sigma = 0 \end{cases}$$

Mit

$$F_{\sigma}(\underline{q}-\underline{\tilde{q}}) \equiv \frac{1}{N_{\perp}} \sum_{R_{\perp}} e^{i(q_{\perp}-\tilde{q}_{\perp})R_{\perp}} e^{-\frac{\sigma^2}{4} \frac{\tilde{q}_z - q_z}{2k_F} R_{\perp}^2}$$

$$= \frac{1}{N_{\perp}} \frac{4\pi}{a^2\sigma^2} \left(\frac{2k_F}{\tilde{q}_z - q_z} \right)^2 \sum_{m,n} e^{-\left(\frac{2k_F}{\tilde{q}_z - q_z} \right)^2 \frac{1}{\sigma^2} \left((q_x - \tilde{q}_x - m \frac{2\pi}{a})^2 + (q_y - \tilde{q}_y - n \frac{2\pi}{a})^2 \right)} \quad (11.6)$$

wird schließlich

$$\langle G(\underline{q}, \underline{q}') \rangle \sim \sum_{\underline{\tilde{q}}} g_{\underline{q}}^{\underline{\tilde{q}}} \pi(q_z, \tilde{q}_z) W(\tilde{q}) \pi(\tilde{q}_z, \tilde{q}_z) W(\tilde{q}) \pi(\tilde{q}_z, q'_z) (g_{\underline{q}'}^{\underline{\tilde{q}}})^*$$

$$\cdot F_{\sigma}(\underline{q}-\underline{\tilde{q}}) F_{\sigma}(\underline{\tilde{q}}-\underline{\tilde{q}}) F_{\sigma}(\underline{\tilde{q}}-\underline{q}')$$

(11.7)

Die Auswahlregeln für die senkrechten Impulskomponenten sind jetzt durch $F_{\sigma}(\underline{q}-\underline{\tilde{q}})$ gegeben. Für $\tilde{q}_z = q_z$ ist $F_{\sigma}(\underline{q}-\underline{\tilde{q}}) = \delta_{\tilde{q}_{\perp}, q_{\perp} + \tau_{\perp}}$, sonst ist diese Funktion eine Summe von Gauss-Verteilungen in den Variablen $q_x - \tilde{q}_x$ und $q_y - \tilde{q}_y$ um reziproke Gittervektoren $(\frac{2\pi}{a}, \frac{2\pi}{a})$. Ihre Halbwertsbreite ist proportional, der Maximalwert umgekehrt proportional zu $\sigma(\frac{q_z - \tilde{q}_z}{2k_F})$.

Wir sehen daraus folgendes:

- a) Normale Prozesse mit $\tilde{q}_z = q_z$, $\tilde{q}_z = \tilde{q}_z$ usw. sind unabhängig von irgendwelchen Phasenkorrelationen. $F_{\sigma}(\underline{\tilde{q}}-\underline{q}) = \delta_{\tilde{q}_{\perp}, q_{\perp} + \tau_{\perp}}$ und $\langle G(\underline{q}, \underline{q}' = \underline{q}) \rangle$ zerfällt in ein einfaches Produkt.

+) Wir setzen der Einfachheit halber $\phi \in (-\infty, \infty)$

- b) Für anomale Prozesse $\tilde{q}_z \in \{q_z \pm 2k_F, q_z \pm 4k_F\}$ usw. ist eine Faktorisierung von $\langle G \rangle$ nur für definierte Phasenkorrelation ($\sigma = 0$) möglich. Wir erhalten dann definierte Auswahlregeln $\delta_{q_\perp, q_\perp + \tau_\perp}$ bzw. $\delta_{q_\perp, q_\perp + Q_\perp + \tau_\perp}$ (für $\phi_{R_\perp} = Q_\perp R_\perp$ und die in den vorhergehenden Kapiteln berechnete Dispersion).
- c) Im Fall vollkommen statistischer Anordnung der Überstruktur-Phasen ($\sigma = \infty$) werden mit den $F_\sigma(\tilde{q}-q)$ alle anomalen Terme zu Null. Das bedeutet, daß die elektron-vermittelte Phonon-Phonon-Kopplung wegfällt. Die Feldamplituden bleiben dieselben und die renormierten Frequenzen sind durch die lediglich "normal" renormierten gegeben. (Glg. 7.6a). Insbesondere tritt kein Gap bei $2k_F$ mehr auf. In diesem Fall findet die von Rietschel /26/ berechnete Phononendispersion eines Peierls-Systems ihre Anwendung.
- d) Der dazwischenliegende Fall ($0 < \sigma < \infty$) unvollkommener Ordnung kennt keine definierten Impulsauswahlregeln. Durch die anomalen Graphen werden im Prinzip alle q_\perp -Werte gemischt, wenn auch mit verschiedenen, durch die F_σ gegebenen Gewichten. Das kompliziert eine Berechnung des Phononenpropagators erheblich, da zum einen die Berücksichtigung auch nur der wichtigsten q_\perp -Kopplungen die Matrizen für \underline{D} und $\underline{\Pi}$ zu unhandlicher Größe aufbläht, zum anderen die einzelnen Summanden der Graphenentwicklung von \underline{D} nicht mehr in Faktoren zerlegbar sind. Dies würde auch für numerische Rechnungen zu einem sehr großen Zeitaufwand führen.

Wir können uns also dieses qualitative Bild vom Übergang geordnet ($\sigma = 0$) \rightarrow ungeordnet ($\sigma = \infty$) machen: Für $\sigma \rightarrow \infty$ verlieren die anomalen Beiträge an Gewicht und das Gap in der Phononendispersion zwischen Phasen- und Amplitudenmode schließt sich allmählich (Wegfallen der Kopplung $2k_F \rightleftharpoons -2k_F$). Gleichzeitig verschwindet die starke Winkelabhängigkeit der Phasenmode (Abb. 11, S. 48) und ebenfalls ihre Infrarot-Aktivität (Wegfallen der Kopplung $2k_F \rightleftharpoons 0$).

In KCP ist bei tiefen Temperaturen $T < 80$ K die Überstrukturkorrelation relativ gut ausgeprägter (wenn auch nicht perfekt). Mit steigender Temperatur verschwindet diese Korrelation. Wir vergleichen deshalb unsere Überlegungen zur Phasenkorrelation mit der Temperaturabhängigkeit experimenteller Daten.

Als Maß für die Ordnung der Überstrukturphasen nehmen wir die Ausprägtheit des Überstruktur-Braggreflexes von KCP bei $(\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}, 2k_F)$. Resultate aus /12/ sind in Abb. 15 dargestellt. Wir sehen, daß die Überstruktur für $T = 6.5$ K gut ausgeprägt ist. Für $T > 100$ K wird der Überstruktur-Reflex jedoch zunehmend verwuschener, bis er bei $T \approx 200$ K verschwunden ist.

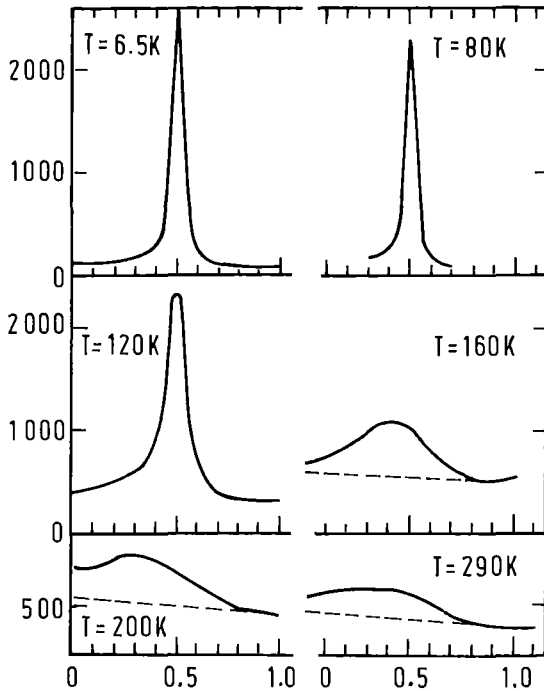


Abb. 15

Intensitätsverteilung (willkürliche Einheiten) des Überstruktur-Bragg-Reflexes bei $(\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}, 2k_F)$ senkrecht zur Kettenrichtung /12/. $q_x = q_y = q$ ist in Einheiten $\frac{2\pi}{a}$ aufgetragen.

Ein "constant- q -scan" bei $\underline{q} = (\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}, 2k_F) /13/$, d.h., eine Messung der Intensität von inelastisch unter Abgabe des festen Impulses $\underline{q} = (\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}, 2k_F)$ und der Energie ω gestreuten Neutronen ist in Abb. 16a) dargestellt. (Der elastische Anteil ist weggelassen.) In Abb. 16b) ist dargestellt, wie wir die Temperaturabhängigkeit dieser Daten im Hinblick auf die verschwindende Phasenkorelation interpretieren. Die Temperaturabhängigkeit über die Phononenbesetzungszahl (s. Glg.(12.7), S. 76) ist zu diesem Zweck durch punktweise Division der Meßpunkte durch $(1 + 1/(e^{\beta\omega} - 1))$ unterdrückt. Bei $T = 60$ K herrscht noch die (nahezu) perfekte Phasenkorelation, die der in Abb. 14 (S. 59) dargestellten Dispersion zugrunde liegt. Die transversale Phasenmode verursacht ein niederenergetisches Nebenmaximum, dagegen ist das Gap zwischen longitudinaler Phasenmode und Amplitudenmode nicht aufgelöst.. Bei $T = 300$ K ist das Gap in der Phonondispersion verschwunden, dieser Fall ist in /26/ beschrieben. Das nur langsame Absinken der Intensität zu kleinen Energieüberträgen bei 300 K deutet auf anharmonische Effekte hin /27/, die in unserer Theorie jedoch nicht berücksichtigt sind.

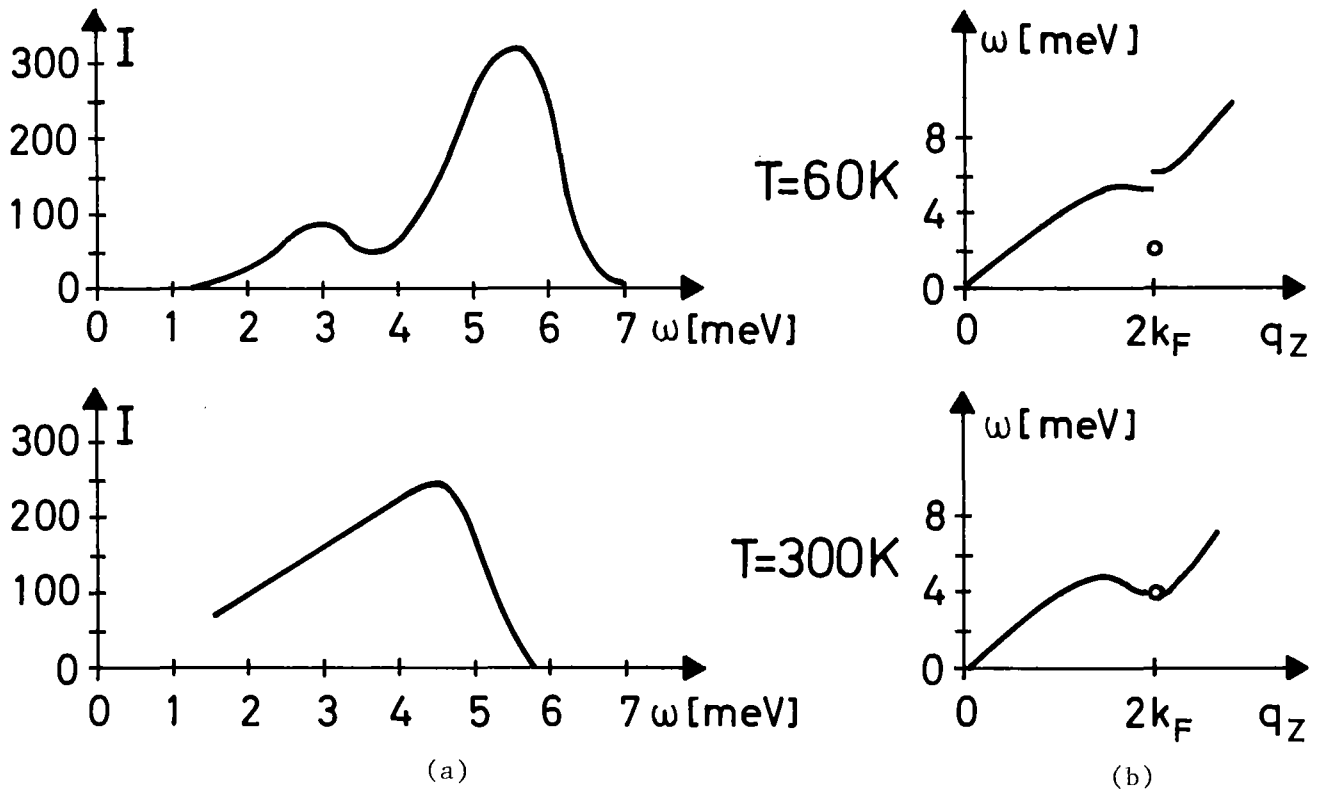


Abb. 16 a) Intensitätsverteilung (willkürliche Einheiten) in einem constant- q -scan bei $q = (0,0,2k_F) / 13/$, s. Text.
 b) qualitative Deutung der Dispersion über ihre Korrelationsabhängigkeit. Der Punkt soll den Endpunkt der "transversalen" Phasenmode $\omega^P(\theta = \frac{\pi}{2})$ darstellen (s. Abb. 13, S. 51).

Auch die optischen Reflektionsdaten im fernen Infrarot /17/, Abb. 17, stimmen mit unseren Überlegungen gut überein. Wir sehen, wie mit abnehmender Phasenkorrelation die Infrarot-Aktivität der Phasenmode verschwindet, da die Kopplung an das elektromagnetische Feld durch den anomalen Prozeß $2k_F \rightleftharpoons 0$ verursacht wird.

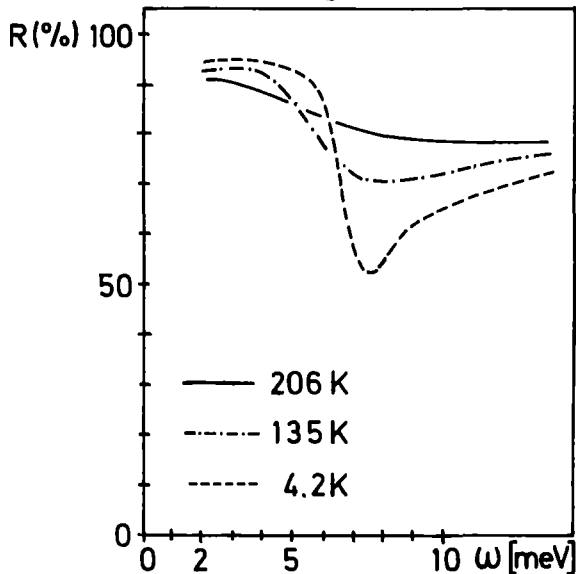


Abb. 17
 Temperaturabhängigkeit der Reflektivität von KCP im fernen Infrarot für parallel zur Kette polarisiertes Licht /17/.

Mit Hilfe der mit steigender Temperatur verschwindenden Phasenkorrelation kann die Temperaturabhängigkeit der geschilderten experimentellen Beobachtungen also qualitativ gut beschrieben werden.

III. Neutronen-Streugesetz $S(\underline{k}, \omega)$

In diesem Abschnitt stellen wir die Verbindung zwischen der Gitterdynamik unseres Systems und dem Streuquerschnitt für thermische Neutronen her. Wir gehen davon aus, daß alle Kristallatome ($\hat{=}$ Pt-Atome in KCP) gleiche Streulänge besitzen, uns interessiert also nur der kohärente Streuquerschnitt, der durch das interferenzfähige Zusammenwirken aller Streuzentren zustande kommt.

Der doppelt differentielle Streuquerschnitt pro Energieintervall $d\omega$ und Raumwinkel $d\Omega$ ist in Born'scher Näherung /22/

$$\frac{d^2\sigma}{d\omega d\Omega} = \frac{k^f}{k^i} \left(\frac{M}{2\pi}\right)^2 |\langle \underline{k}^f | \langle f | H' | i \rangle | \underline{k}^i \rangle|^2 \delta(\omega + \epsilon_i - \epsilon_f)$$

M ist die reduzierte Masse des Neutrons, das durch die Wechselwirkung H' mit dem Kristall vom Zustand $|\underline{k}^i\rangle$ in den Zustand $|\underline{k}^f\rangle$ gestreut wird. Der Festkörper geht dabei vom Zustand $|i\rangle$ der Energie ϵ_i in den Zustand $|f\rangle$ der Energie ϵ_f über und nimmt dabei die Energie $\omega = \epsilon_f - \epsilon_i$ vom Neutron auf. Falls H' durch eine Summe von 2-Teilchen-Wechselwirkungen V gegeben ist, läßt sich der Streuquerschnitt schreiben als

$$\frac{d^2\sigma}{d\omega d\Omega} = A_{\underline{k}} S(\underline{k}, \omega) \quad \underline{k} = \underline{k}^i - \underline{k}^f$$

$A_{\underline{k}} = \frac{k^f}{k^i} \left(\frac{M}{2\pi}\right)^2 |V_{\underline{k}}|^2$ mit $V_{\underline{k}} = \int d^3r e^{-i\underline{k}\underline{r}} V(\underline{r})$ beschreibt durch das Wechselwirkungspotential $V_{\underline{k}}$ den Streumechanismus und mit \underline{k}^f , \underline{k}^i und M Eigenschaften des gestreuten Teilchens.

$$S(\underline{k}, \omega) = \frac{1}{2\pi} \int dt e^{i\omega t} \sum_{j,1} \langle e^{-i\underline{k}\underline{R}_j(t)} e^{i\underline{k}\underline{R}_1(0)} \rangle_T$$

ist dagegen allein durch die Systemeigenschaften - in Abwesenheit der Streusonde - bestimmt. (Dabei soll $\sum_{j,1}$ Summation über alle Streuzentren bedeuten). Die $\underline{R}_j(t)$ sind dabei die Ortsoperatoren der Streuzentren, in unserem Fall der Pt-Kerne, zur Zeit t . $\langle \rangle_T$ bedeutet thermische Mittelung über die exakten Eigenzustände, bei ungeordneten Systemen außerdem Konfigurationsmittelung (in unserem Fall über statistisch verteilte Überstrukturphasen) in einer kanonischen Gesamtheit der Temperatur T .

Die physikalische Bedeutung von $S(\underline{k}, \omega)$ wird deutlicher in einer anderen Form: Mit Hilfe der Fouriertransformierten der Teilchendichtefunktion

$$\begin{aligned} \rho_{\underline{k}}(t) &= \int d^3r e^{-i\underline{k}\underline{r}} \rho(\underline{r}, t) \\ &= \int d^3r e^{-i\underline{k}\underline{r}} \sum_j \delta(\underline{r} - \underline{R}_j(t)) = \sum_j e^{-i\underline{k}\underline{R}_j(t)} \end{aligned}$$

ist

$$S(\underline{k}, \omega) = \frac{1}{2\pi} \int dt e^{i\omega t} \langle \rho_{\underline{k}}(t) \rho_{\underline{k}}^*(0) \rangle_T$$

$S(\underline{k}, \omega)$ ist also durch die Dichte-Dichte-Korrelationsfunktion der streuenden Atomkerne bestimmt. Kohärente Neutronenstreuung liefert uns Information über diese Funktion.

12. Zurückführung von $S(\underline{k}, \omega)$ auf die renormierten Phononamplituden und -frequenzen.

Die Dichtekorrelation der Atome in einem Kristall ist durch 2 Anteile gegeben:

- die Kristallstruktur, d.h. die Gleichgewichtslagen \underline{R}_j^0 der Streuzentren⁺⁾
- die Gitterschwingungen, d.h. die kohärenten Auslenkungen $\delta \underline{R}_j(t)$ der Streuzentren aus ihrer Ruhelage, beschrieben durch Phononen.

Dies wird im folgenden näher ausgeführt:

$$S(\underline{k}, \omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} F(\underline{k}, t) \quad (12.1a)$$

mit

$$\begin{aligned} F(\underline{k}, t) &= \sum_{j,1} \langle e^{-i\underline{k}\underline{R}_j(t)} e^{i\underline{k}\underline{R}_1(0)} \rangle_T \\ &= \sum_{j,1} \langle e^{-i\underline{k}(\underline{R}_j^0 - \underline{R}_1^0)} e^{-i\underline{k}\delta \underline{R}_j(t)} e^{i\underline{k}\delta \underline{R}_1(0)} \rangle_T \end{aligned} \quad (12.1b)$$

⁺⁾ In diesem Kapitel soll unter \underline{R}_j^0 die Kristallstruktur mit Peierlsverzerrung verstanden werden.

Da wir in der harmonischen Näherung arbeiten, gilt /22/

$$F(\underline{k}, t) = \sum_{j,1} e^{-i\underline{k} \cdot (\underline{R}_j^0 - \underline{R}_1^0)} e^{-\frac{1}{2} \langle |\underline{k} \cdot \delta \underline{R}_j(t)|^2 + |\underline{k} \cdot \delta \underline{R}_1(0)|^2 \rangle_T + \langle (\underline{k} \cdot \delta \underline{R}_j(t)) (\underline{k} \cdot \delta \underline{R}_1(0)) \rangle_T} \quad (12.2)$$

Mit der Darstellung

$$\begin{aligned} \delta \underline{R}_j(t) &= \sqrt{\frac{1}{NM}} \sum_{\underline{q}} \underline{\varepsilon}_{\underline{q}} e^{i\underline{q} \cdot \underline{R}_j^0} \underline{\phi}_{\underline{q}}(t) \\ &= \sqrt{\frac{1}{NM}} \sum_{\underline{q}} \underline{\varepsilon}_{\underline{q}} e^{i\underline{q} \cdot \underline{R}_j^0} \sum_{\lambda=1,2} A_{\lambda}(\underline{q}) \phi_{\lambda}(\underline{q}, t) \end{aligned}$$

mit (Glg. (7.5), $\underline{q}' = \underline{q}_z - 4k_F \text{sign} \underline{q}_z$)

$$A_1(\underline{q}) = \begin{cases} \cos \chi_{\underline{q}} & \text{für } |\underline{q}_z| < 4k_F \\ 1 & \text{für } |\underline{q}_z| > 4k_F \end{cases} \quad A_2(\underline{q}) = \begin{cases} \text{sign} \Pi(\underline{q}, \underline{q}') \sin \chi_{\underline{q}} & \text{für } |\underline{q}_z| < 4k_F \\ 0 & \text{für } |\underline{q}_z| > 4k_F \end{cases}$$

wird

$$\begin{aligned} \langle |\underline{k} \cdot \delta \underline{R}_j(t)|^2 \rangle_T &= \frac{1}{NM} \sum_{\underline{q}} |(\underline{k} \cdot \underline{\varepsilon}_{\underline{q}})|^2 \sum_{\lambda=1,2} A_{\lambda}^2(\underline{q}) \langle \phi_{\lambda}(\underline{q}, t) \phi_{\lambda}^+(\underline{q}, t) \rangle_T \\ &= \frac{1}{NM} \sum_{\underline{q}} |(\underline{k} \cdot \underline{\varepsilon}_{\underline{q}})|^2 \sum_{\lambda} \frac{A_{\lambda}^2(\underline{q}) (1 + 2 \langle N_{\lambda}(\underline{q}) \rangle_T)}{2\omega_{\lambda}(\underline{q})} \\ &\equiv \langle |\underline{k} \cdot \delta \underline{R}_1(0)|^2 \rangle_T \end{aligned}$$

mit dem (zeitunabhängigen) Phononzahloperator $N_{\lambda}(\underline{q}) = B_{\lambda}^+(\underline{q}, t) B_{\lambda}(\underline{q}, t)$.

Daraus resultiert durch Einsetzen in Gleichung (12.2) der Debye-Waller Faktor $e^{-2W_{\underline{k}}}$ mit

$$2W_{\underline{k}} = \frac{1}{NM} \sum_{\underline{q}} |(\underline{k} \cdot \underline{\varepsilon}_{\underline{q}})|^2 \sum_{\lambda} \frac{A_{\lambda}^2(\underline{q}) (1 + 2 \langle N_{\lambda}(\underline{q}) \rangle_T)}{2\omega_{\lambda}(\underline{q})} \quad (12.3)$$

Für den letzten Term in Gleichung (12.2) erhalten wir:

$$\begin{aligned} & \exp \{ \langle (\underline{k} \cdot \delta \underline{R}_j(t)) (\underline{k} \cdot \delta \underline{R}_1(0)) \rangle_T \} \\ & = \exp \left\{ \frac{1}{NM} \sum_{\underline{q}} |(\underline{k} \cdot \underline{\varepsilon}_{\underline{q}})|^2 e^{i\underline{q}(\underline{R}_j^0 - \underline{R}_1^0)} \sum_{\lambda} A_{\lambda}^2(\underline{q}) \langle \phi_{\lambda}(\underline{q}, t) \phi_{\lambda}^+(\underline{q}, 0) \rangle_T \right\} \end{aligned}$$

Diesen Faktor entwickeln wir nach Potenzen von $\frac{1}{N}$ und erhalten (Glg. (12.1))

$$\begin{aligned} S(\underline{k}, \omega) & = e^{-2W_{\underline{k}}} \frac{1}{2\pi} \int dt e^{i\omega t} \sum_{j,1} e^{-i\underline{k}(\underline{R}_j^0 - \underline{R}_1^0)} \\ & \cdot \left\{ 1 + \frac{1}{NM} \sum_{\underline{q}} |(\underline{k} \cdot \underline{\varepsilon}_{\underline{q}})|^2 e^{i\underline{q}(\underline{R}_j^0 - \underline{R}_1^0)} \sum_{\lambda} A_{\lambda}^2(\underline{q}) \langle \phi_{\lambda}(\underline{q}, t) \phi_{\lambda}^+(\underline{q}, 0) \rangle_T + O\left(\frac{1}{N^2}\right) \right\} \end{aligned} \quad (12.4)$$

Der erste Teil von $S(\underline{k}, \omega)$ ist allein durch die Kristallstruktur bestimmt und liefert den elastischen Streuquerschnitt $S^0(\underline{k}, \omega)$

$$S^0(\underline{k}, \omega) = e^{-2W_{\underline{k}}} \cdot \delta(\omega) \left| \sum_j e^{-i\underline{k} \underline{R}_j^0} \right|^2$$

wobei $\underline{R}_j^0 = (j_x a, j_y a, j_z c) + (0, 0, c \delta \sin(2k_F c j_z + \phi_{j_x, j_y}))$ sich (wie für dieses Kapitel vereinbart) aus äquidistanter Grundstruktur und Peierls-Überstruktur zusammensetzt. Also ist

$$\begin{aligned} S^0(\underline{k}, \omega) & \approx e^{-2W_{\underline{k}}} \delta(\omega) \left| \sum_j e^{-i\underline{k}(j_x a, j_y a, j_z c)} (1 - i k_z c \delta \sin(2k_F c j_z + \phi_{j_x, j_y})) \right|^2 \\ & = e^{-2W_{\underline{k}}} \delta(\omega) \cdot N^2 \left(\delta_{\underline{k}, \underline{\tau}} + (2k_z \delta c)^2 \frac{\delta_{\underline{k}, \underline{\tau} + \underline{Q}} + \delta_{\underline{k}, \underline{\tau} - \underline{Q}}}{4} \right) \end{aligned} \quad (12.5)$$

$$(\underline{Q} = (Q_x, Q_y, 2k_F))$$

Beim letzten Gleichheitszeichen haben wir die Phasenordnung $\phi_{j_x, j_y} = Q_x j_x + Q_y j_y$ angenommen. Neben den eigentlichen Bragg-Reflexen für $\underline{k} = \underline{\tau}$ treten also auch proportional zu δ^2 schwächere Überstrukturereflexe bei $\underline{k} = \underline{\tau} + (Q_x, Q_y, 2k_F)$ auf. Der elastische Strukturfaktor für KCP ist in /12/, /25/ näher untersucht.

Der zweite Teil von $S(\underline{k}, \omega)$ beschreibt die inelastische Streuung eines Neutrons am Kristall unter gleichzeitiger Erzeugung oder Vernichtung eines Phonons.

$$\begin{aligned} S^1(\underline{k}, \omega) & = e^{-2W_{\underline{k}}} \frac{1}{2\pi} \int dt e^{i\omega t} \frac{1}{NM} \sum_{\underline{q}} |(\underline{k} \cdot \underline{\varepsilon}_{\underline{q}})|^2 \left| \sum_j e^{-i(\underline{k} - \underline{q}) \underline{R}_j^0} \right|^2 \\ & \cdot \sum_{\lambda} A_{\lambda}^2(\underline{q}) \langle \phi_{\lambda}(\underline{q}, t) \phi_{\lambda}^+(\underline{q}, 0) \rangle_T \\ & = N^2 e^{-2W_{\underline{k}}} \cdot |(\underline{k} \cdot \underline{\varepsilon}_{\underline{k}})|^2 \frac{1}{NM} \sum_{\lambda} A_{\lambda}^2(\underline{k}) \cdot C_{\lambda}(\underline{k}, \omega) \end{aligned} \quad (12.6)$$

mit der Korrelationsfunktion

$$C_{\lambda}(k, \omega) = \frac{1}{2\pi} \int dt e^{i\omega t} \langle \phi_{\lambda}(k, t) \phi_{\lambda}^+(k, 0) \rangle_T.$$

(Dabei haben wir $\sum_j e^{-i(\underline{k}-\underline{q})R_j^0} = N \delta_{\underline{k}, \underline{q}+\underline{\Gamma}}$ verwendet, die Überstruktur an dieser Stelle also außer acht gelassen, da die resultierenden Satelliten-Phononen keine meßbaren Streuintensitäten liefern. Weiter ist berücksichtigt, daß $\varepsilon_{\underline{q}+\underline{\Gamma}} = \varepsilon_{\underline{q}}$, $A_{\lambda}(\underline{q}+\underline{\Gamma}) = A_{\lambda}(\underline{q})$ und $\phi_{\lambda}(\underline{q}+\underline{\Gamma}) = \phi_{\lambda}(\underline{q})$ gilt.)

Die zeitliche Entwicklung der Heisenbergoperatoren $\phi(\underline{q}, t)$ ist (im Rahmen unserer Näherung) durch den renormierten Hamiltonoperator $H^{Ph} = \sum_{\underline{q}, \lambda} \omega_{\lambda}(\underline{q}) B_{\lambda}^+(\underline{q}) B_{\lambda}(\underline{q})$, Glg. (7.8), bestimmt.

Mit

$$B_{\lambda}(\underline{q}, t) = B_{\lambda}(\underline{q}) e^{-i\omega_{\lambda}(\underline{q})t}$$

$$B_{\lambda}^+(\underline{q}, t) = B_{\lambda}^+(\underline{q}) e^{+i\omega_{\lambda}(\underline{q})t}$$

$$\phi_{\lambda}(\underline{q}, t) = \frac{1}{\sqrt{2\omega_{\lambda}(\underline{q})}} (B_{\lambda}(\underline{q}) e^{-i\omega_{\lambda}(\underline{q})t} + B_{\lambda}^+(-\underline{q}) e^{i\omega_{\lambda}(\underline{q})t})$$

wird

$$\begin{aligned} C_{\lambda}(\underline{k}, \omega) &= \frac{1}{2\pi} \int dt e^{i\omega t} \frac{1}{2\omega_{\lambda}(\underline{k})} \left[\langle B_{\lambda}(\underline{k}, t) B_{\lambda}^+(\underline{k}, 0) \rangle_T + \langle B_{\lambda}^+(-\underline{k}, t) B_{\lambda}(-\underline{k}, 0) \rangle_T \right] \\ &= \frac{1}{2\omega_{\lambda}(\underline{k})} \frac{1}{2\pi} \int dt e^{i\omega t} \left[e^{-i\omega_{\lambda}(\underline{k})t} \{1 + \langle N_{\lambda}(\underline{k}) \rangle_T\} + e^{i\omega_{\lambda}(\underline{k})t} \langle N_{\lambda}(-\underline{k}) \rangle_T \right] \\ &= \frac{1}{2\omega_{\lambda}(\underline{k})} \left[\delta(\omega - \omega_{\lambda}(\underline{k})) (1 + \langle N_{\lambda}(\underline{k}) \rangle_T) + \delta(\omega + \omega_{\lambda}(\underline{k})) \langle N_{\lambda}(\underline{k}) \rangle_T \right] \end{aligned}$$

mit der Bose-Besetzungszahl

$$\langle N_{\lambda}(\underline{k}) \rangle_T = \left[e^{\beta\omega_{\lambda}(\underline{k})} - 1 \right]^{-1}, \quad \beta = \frac{1}{k_B T}$$

Damit erhalten wir für den Einphonon-Anteil des Streugesetzes

$$S^1(\underline{k}, \omega) = \frac{N}{M} e^{-2W_{\underline{k}}} \left| \langle \underline{k} \cdot \underline{\varepsilon}_{\underline{k}} \rangle \right|^2 \sum_{\lambda} \frac{A_{\lambda}^2(\underline{k})}{2\omega_{\lambda}(\underline{k})} \left[(1 + \langle N_{\lambda}(\underline{k}) \rangle_T) \delta(\omega - \omega_{\lambda}(\underline{k})) + \langle N_{\lambda}(\underline{k}) \rangle_T \delta(\omega + \omega_{\lambda}(\underline{k})) \right] \quad (12.7)$$

$S^1(\underline{k}, \omega)$ ist also durch die beiden Zweige $\omega_{\lambda}(\underline{k})$, $\lambda = 1, 2$, (Glg. (7.6), Abb. 8a)) bestimmt. Gleichzeitig ist aber das Gewicht $A_{\lambda}^2(\underline{k})$ (s. S. 69) wichtig, mit dem diese Zweige in das Streugesetz eingehen. Bei $q_z = 2k_F$ tragen beide Zweige gleichermaßen bei, wenn wir uns jedoch von diesem Punkt entfernen, verlagert sich das Gewicht hauptsächlich auf einen Zweig allein (S. 30 ff.). Das ist als "effektive" Dispersion in Abb. 18 dargestellt.

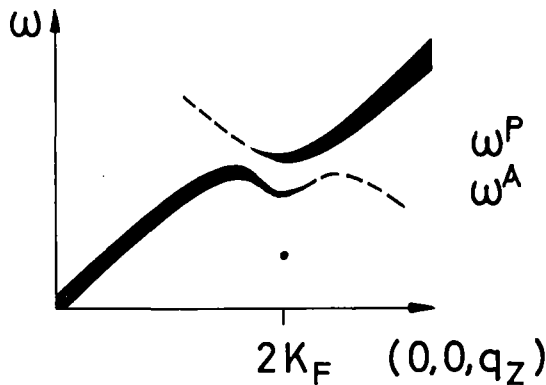


Abb. 18

"Effektive" Dispersion: Die Stärke der Linien soll das Gewicht, mit dem die beiden Zweige in $S^1(\underline{k}, \omega)$ eingehen, symbolisieren. Der Punkt deutet die Lage von $\omega^P(\theta = \frac{\pi}{2})$ an (Abb. 13a)).

Für $\omega > 0$ beschreibt $S^1(\underline{k}, \omega)$ Energieabgabe vom Neutron an den streuenden Festkörper: ein Phonon wird erzeugt. $\omega < 0$ bedeutet Phononvernichtung, das Neutron nimmt Energie auf. Zwischen den beiden Prozessen besteht das Gesetz des detaillierten Gleichgewichts

$$S^1(\underline{k}, \omega) = e^{\beta\omega} S^1(-\underline{k}, -\omega)$$

Durch Einsetzen der in Kapitel II gefundenen Dispersion $\omega_{\lambda}(\underline{k})$ und der $A_{\lambda}(\underline{k})$ stellen wir Verbindung zu den dort gewonnenen Resultaten her. Da der Bose-Faktor bei $T = 60$ K mit ω stark variiert⁺⁾ , wird er temperaturabhängig in $S^1(\underline{k}, \omega)$ eingefügt. (Eine auffallende temperaturabhängige Veränderung in der Dispersion erwarten wir lediglich über die mit wachsendem T verschwindende Überstruktur-Phasenkorrelation, wie in Abschnitt 11 beschrieben ($T \ll \frac{2\Delta}{k_B} \approx 2000$ K).)

⁺⁾ $\frac{h\omega}{k_B T} \approx 1 - 10$ für typische Phononfrequenz 10 meV - 100 meV und $T \approx 100$ K.

13. Faltung von $S^1(\underline{k}, \omega)$ mit instrumenteller Auflösungsellipse, numerische Resultate

Im letzten Abschnitt haben wir ausgerechnet, mit welcher Wahrscheinlichkeit ein an unserem Modell-System unter Abgabe des Impulses \underline{k} gestreutes Neutron die Energie ω verliert. Um diese Vorhersage an einem realen Kristall zu überprüfen, messen wir im Experiment die relativen Intensitäten von am Kristall gestreuten Neutronen, die eine definierte Energie ω und einen definierten Impuls \underline{k} abgegeben haben. Diese Intensitäten sollten dann, wie aus der Formel für den doppelt differentiellen Streuquerschnitt (S. 67) hervorgeht, proportional zu $S(\underline{k}, \omega)$ sein.

In einem realen Experiment gelingt uns die Ausfilterung vorgegebener Impuls- bzw. Energiewerte jedoch nicht beliebig gut. Stellen wir unsere Filter auf Durchlass der Teilchen mit $(\underline{k}^0, \omega^0)$ ein, so gelangen auch noch Teilchen mit (\underline{k}, ω) aus der Umgebung dieses Wertes mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit hindurch. Diese Wahrscheinlichkeit wird durch eine Auflösungsfunktion $F(\underline{k}, \omega; \underline{k}^0, \omega^0)$ beschrieben. Für unser Neutronenspektrometer können wir sie als Gauss-Funktion ansetzen.

$$F(\underline{k}, \omega; \underline{k}^0, \omega^0) = F(\underline{k} - \underline{k}^0, \omega - \omega^0) = \frac{1}{2\pi^2 \sigma^3 \rho} e^{-\frac{(\underline{k} - \underline{k}^0)^2}{\sigma^2}} e^{-\frac{(\omega - \omega^0)^2}{\rho^2}}$$

Die gemessene inelastische Intensität, die wir den "Einstellwerten" $(\underline{k}^0, \omega^0)$ zuordnen, ist dann proportional zu

$$I(\underline{k}^0, \omega^0) = \int d^3k \int d\omega F(\underline{k} - \underline{k}^0, \omega - \omega^0) S^1(\underline{k}, \omega) \quad (13.1)$$

Wir messen in Wirklichkeit also immer ganze Phonongruppen. Damit wird auch die Dispersion in der Nähe des Aufpunktes wichtig. Im Fall a) (Abb. 19) ändert sich die Phononfrequenz im Auflösungsbereich wenig, wir bekommen ein deutliches enges Maximum bei $\omega^0 = \tilde{\omega}$, falls wir ω^0 bei festem $\underline{k}^0 = \tilde{\underline{k}}$ variieren. Im Fall b) haben wir eine steile Dispersion. Das hat eine in ω^0 verschmierte Intensität zur Folge, deren Intensitätsmaximum zu dem recht niedrig ist, da jeweils nur eine kleine Anzahl von Phononzuständen ins Auflösungsellipsoid fällt. Ein solcher Effekt tritt im Peierlssystem im Bereich der $2k_F$ -Phononanomalie auf. Da im LRA-Modell die Dispersion von Amplituden- und Phasenmode sehr steil ist /8/ (S.41), wurde die Frage gestellt, ob genügend Streuintensität von einer solchen Phonongruppe zu erwarten sei. Da in unserem erweiterten Modell

aber alle Frequenzen bei $2k_F$ endlich bleiben, und die Dispersion deswegen an diesen Stellen waagrechte Tangenten hat, erwarten wir aufgrund der dann höheren Zustandsdichte auch dort meßbare Intensitäten.

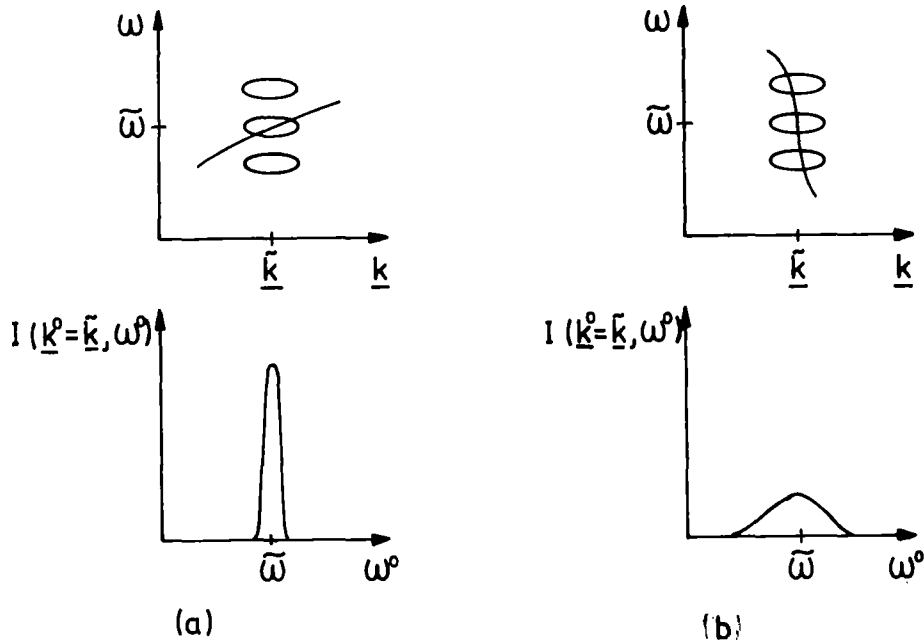


Abb. 19 Messung der zum Impuls \underline{k} gehörenden Phononfrequenz $\tilde{\omega}$. Wegen der nicht beliebig guten instrumentellen Auflösung (Ellipse) spielt auch die Umgebung ($\hat{=}$ Dispersionskurve) des zu messenden Phonons ($\underline{k}, \tilde{\omega}$) eine Rolle: a) flache b) steile Dispersion.

Wir setzen $S^1(\underline{k}, \omega)$ in Glg. (13.1) ein:

$$I(\underline{k}^0, \omega^0) = C \int d^3k \int d\omega e^{-\frac{(\underline{k}-\underline{k}^0)^2}{\sigma^2}} e^{-\frac{(\omega-\omega^0)^2}{\rho^2}} \cdot k^2 \sum_{\lambda} \frac{A_{\lambda}^2(\underline{k})}{2\omega_{\lambda}(\underline{k})} \left[(1 + \langle N_{\lambda}(\underline{k}) \rangle_T) \delta(\omega - \omega_{\lambda}(\underline{k})) + \langle N_{\lambda}(\underline{k}) \rangle_T \delta(\omega + \omega_{\lambda}(\underline{k})) \right] \quad (13.2)$$

($\epsilon_{\underline{k}}$ wurde über den Auflösungsbereich als konstant und Kettenparallel angenommen. C enthält (\underline{k}, ω) -unabhängige Vorfaktoren, außerdem den über den Auflösungsbereich nahezu konstanten Debye-Waller-Faktor.) Wir beschränken uns im folgenden auf $\omega > 0$, also Phononerzeugung:

$$I(\underline{k}^0, \omega^0) = C \sum_{\lambda} \int d^3k e^{-\frac{(\underline{k}-\underline{k}^0)^2}{\sigma^2}} e^{-\frac{(\omega_{\lambda}(\underline{k})-\omega^0)^2}{\rho^2}} k^2 A_{\lambda}^2(\underline{k}) \frac{1 + \langle N_{\lambda}(\underline{k}) \rangle_T}{2\omega_{\lambda}(\underline{k})} \quad (13.3)$$

Da $A_{\lambda}(\underline{k}) = A_{\lambda}(k_{\rho}, k_z)$ und $\omega_{\lambda}(\underline{k}) = \omega_{\lambda}(k_{\rho}, k_z)$, $k_{\rho} = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$, ist (für parallele Anordnung der Überstrukturphasen), gehen wir zu Zylinderkoordinaten über:

$$\begin{aligned}
 I(\underline{k}^0, \omega^0) &= C \sum_{\lambda} \int d\phi \int dk_z \int dk_{\rho} k_{\rho} e^{-\frac{1}{\sigma^2} (k_{\rho}^2 + k_z^0 - 2k_{\rho} k_z^0 \cos(\phi - \phi^0))} \\
 &\cdot e^{-\frac{(k_z - k_z^0)^2}{\sigma^2}} e^{-\frac{(\omega_{\lambda}(k_{\rho}, k_z) - \omega^0)^2}{\rho^2}} (k_{\rho}^2 + k_z^2) A_{\lambda}^2(k_{\rho}, k_z) \frac{1 + \langle N_{\lambda}(k_{\rho}, k_z) \rangle_T}{2\omega_{\lambda}(k_{\rho}, k_z)} \\
 &= C 2\pi e^{-\frac{k_{\rho}^0}{\sigma^2}} \sum_{\lambda} \int dk_z \int dk_{\rho} I_0\left(\frac{2k_{\rho} k_z^0}{\sigma^2}\right) e^{-\frac{k_{\rho}^2}{\sigma^2}} e^{-\frac{(k_z - k_z^0)^2}{\sigma^2}} \\
 &\cdot e^{-\frac{(\omega_{\lambda}(k_{\rho}, k_z) - \omega^0)^2}{\rho^2}} k_{\rho} (k_{\rho}^2 + k_z^2) A_{\lambda}^2(k_{\rho}, k_z) \frac{1 + \langle N_{\lambda}(k_{\rho}, k_z) \rangle_T}{2\omega_{\lambda}(k_{\rho}, k_z)}
 \end{aligned}$$

(I_0 ist die Besselfunktion erster Art, nullter Ordnung mit imaginärem Argument, $I_0(x) = J_0(ix)$.)

Wir legen den Aufpunkt nun in Kettenrichtung, $\underline{k}^0 = (0, 0, k_z^0)$, und erhalten mit $I^0(0) = 1$:

$$\begin{aligned}
 I(\underline{k}^0, \omega^0) &= 2\pi C \sum_{\lambda} \int dk_z e^{-\frac{(k_z - k_z^0)^2}{\sigma^2}} \int dk_{\rho} e^{-\frac{k_{\rho}^2}{\sigma^2}} e^{-\frac{(\omega_{\lambda}(k_{\rho}, k_z) - \omega^0)^2}{\rho^2}} \\
 &k_{\rho} (k_{\rho}^2 + k_z^2) A_{\lambda}^2(k_{\rho}, k_z) \frac{1 + \langle N_{\lambda}(k_{\rho}, k_z) \rangle_T}{2\omega_{\lambda}(k_{\rho}, k_z)} \tag{13.4}
 \end{aligned}$$

Glg. (13.4) haben wir numerisch unter Verwendung der in Kap. II gewonnenen "Modelldispersion" (Abb. 14, S. 59) ausgewertet.

Das resultierende Höhenliniendiagramm ist in Abb. 20 dargestellt.

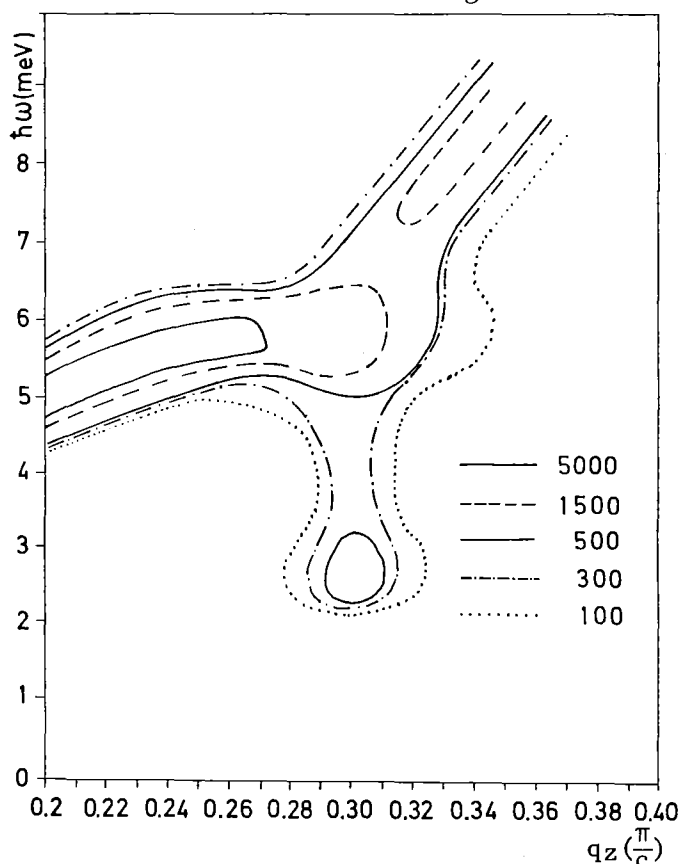


Abb. 20 Resultat der Faltung der Dispersion von Abb.14 mit Auflösungs-
ellipse (Daten wie bei Abb. 3, $T = 60 \text{ K}$, $2k_F \cong 0.3 \frac{\pi}{c}$).

Ein Vergleich mit Abb. 3, S. 5 zeigt, daß dieses "Modell-Experiment" zum qualitativ gleichen Ergebnis wie das "echte" Experiment führt. Durch ω_T^P erhalten wir eine "Intensitätsinsel" bei ca. 2.5 eV, deren Verbindung zu höheren Energieüberträgen eine Taille aufweist. Die ebenfalls zu sehende Verbreiterung des "eigentlichen" Phononenzweiges deuten wir im Rahmen unseres Modell durch die Aufspaltung zwischen ω_L^P und ω^A (Abb. 14). Dieses Gap kann mit der angegebenen instrumentellen Auflösung jedoch nicht unmittelbar gesehen werden.

Fassen wir nun dieses Ergebnis und die Resultate aus Abschnitt 11 zusammen, so erscheint uns die in dieser Arbeit dargelegte Theorie gut geeignet zu sein, die $2k_F$ -Phonon-Anomalie und die damit zusammenhängenden Eigenschaften eines Peierls-Systems wie KCP zu verstehen.

Anhang

Einfluß der Phasenmode auf Leitfähigkeit und dielektrische Funktion.

Wir berechnen die dielektrische Funktion $\epsilon(\underline{q} = 0, \omega)$ für die Kettenrichtung unter Einschluß der Fourierkomponenten $\tilde{\underline{q}} = 0, \pm(Q_x, Q_y, 2k_F)^+$ der Elektron-Elektron-Wechselwirkung. Dazu berechnen wir für unser Peierlssystem die Antwortfunktion auf eine äußere elektromagnetische Störung. Dies geschieht in RPA, wir weisen die Eichinvarianz dieser Näherung auch bei Mitnahme anomaler Graphen mit Hilfe der Ward-Identität nach. Umklapp-Prozesse lassen wir außer acht (Jellium-Modell innerhalb der Ketten).

Die dielektrische Funktion steht mit dieser Antwortfunktion in folgendem Zusammenhang:

Eine externe Ladungsverteilung $-\epsilon\rho^{\text{ext}}(\underline{r}, t)$ erzeugt ein Potential $\nabla^2\phi(\underline{r}, t) = 4\pi\epsilon\rho^{\text{ext}}(\underline{r}, t)$ und ein Verschiebungsfeld $\nabla D(\underline{r}, t) = -4\pi\epsilon\rho^{\text{ext}}(\underline{r}, t)$. Im Festkörper induziert diese Störung eine Ladung $-\epsilon\rho(\underline{r}, t)$. Dies führt zum elektrischen Feld $\nabla E(\underline{r}, t) = -4\pi\epsilon[\bar{\rho}^{\text{ext}}(\underline{r}, t) + \rho(\underline{r}, t)]$. Der (für unsere tetragonale Symmetrie diagonale) dielektrische Tensor $\epsilon(\underline{r}, \underline{r}', t)$ verbindet $D(\underline{r}, t)$ und $E(\underline{r}, t)$

$$D(\underline{r}, t) = \int d\underline{r}' \epsilon(\underline{r}, \underline{r}', t) E(\underline{r}', t)$$

Wir gehen zu den Fouriertransformierten über

$$\left[f(\underline{q}, \underline{q}', \omega) = \int d\underline{r} \int d\underline{r}' \int dt e^{-i\underline{q}\underline{r}} e^{i\underline{q}'\underline{r}'} e^{i\omega t} f(\underline{r}, \underline{r}', t) \right]$$

$$-q^2\phi(\underline{q}, \omega) = 4\pi\epsilon\rho^{\text{ext}}(\underline{q}, \omega) \quad (\text{A.1a})$$

$$i qD(\underline{q}, \omega) = -4\pi\epsilon\rho^{\text{ext}}(\underline{q}, \omega) \quad (\text{A.1b})$$

$$i qE(\underline{q}, \omega) = -4\pi\epsilon[\rho^{\text{ext}}(\underline{q}, \omega) + \rho(\underline{q}, \omega)] \quad (\text{A.1c})$$

$$D(\underline{q}, \omega) = \sum_{\underline{q}'} \epsilon(\underline{q}, \underline{q}', \omega) E(\underline{q}', \omega) \quad (\text{A.1d})$$

⁺) $\phi_{R_x, R_y} = (Q_x, Q_y) \cdot (R_x, R_y)$ ist die Überstruktur-Phasenkorrelation auf verschiedenen Ketten, die wir während der Rechnung voraussetzen.

In diesen Gleichungen haben wir uns bereits auf longitudinale Felder parallel zur Kettenrichtung spezialisiert (indem wir $\underline{q} \cdot \underline{E} = qE$ usw. setzten). $\varepsilon(\underline{q}, \underline{q}', \omega)$ hängt wegen der Peierls-Überstruktur von zwei Impulskomponenten \underline{q} und \underline{q}' ab. \underline{q}' kann die Werte $\underline{q} \pm n$ ($Q_x, Q_y, 2k_F$), $n = 0, \pm 1, \pm 2$, annehmen. Die Größe, die wir im Hauptteil (S. 52) und weiter oben (ungenau) $\varepsilon(\underline{q} = 0, \omega)$ genannt haben, ist $\varepsilon(\underline{q} = 0, \underline{q} = 0, \omega)$. Mit (einem Teil) der Antwortfunktion erhalten wir nun den Zusammenhang von $\phi(\underline{q}, \omega)$ und $\rho(\underline{q}, \omega)$ in der Form

$$\rho(\underline{q}, \omega) = \sum_{\underline{q}'} R_{oo}(\underline{q}, \underline{q}', \omega) \phi(\underline{q}', \omega) \quad (\text{A.2})$$

$R_{\mu\nu}$ ist in Glg. (A.7c) definiert. Aus Glg. (A.1) und (A.2) folgt

$$E(\underline{q}, \omega) = \sum_{\underline{q}'} \left\{ \delta_{\underline{q}, \underline{q}'} + \frac{4\pi e^2}{q q'} \frac{1}{e^2} R_{oo}(\underline{q}, \underline{q}', \omega) \right\} D(\underline{q}', \omega) \quad (\text{A.3})$$

Wir definieren nun mit $\underline{Q} = (Q_x, Q_y, 2k_F)$ die Vektoren

$$\underline{D}(\underline{q}, \omega) = \begin{pmatrix} D(\underline{q}, \omega) \\ D(\underline{q} - 2\underline{Q}, \omega) \\ D(\underline{q} - \underline{Q}, \omega) \end{pmatrix}$$

und analog den Vektor $\underline{E}(\underline{q}, \omega)$; außerdem die Matrix

$$\underline{\varepsilon}(\underline{q}, \omega) = \begin{pmatrix} \varepsilon(\underline{q}, \underline{q}, \omega) & \varepsilon(\underline{q}, \underline{q} - 2\underline{Q}, \omega) & \varepsilon(\underline{q}, \underline{q} - \underline{Q}, \omega) \\ \varepsilon(\underline{q} - 2\underline{Q}, \underline{q}, \omega) & \varepsilon(\underline{q} - 2\underline{Q}, \underline{q} - 2\underline{Q}, \omega) & \varepsilon(\underline{q} - 2\underline{Q}, \underline{q} - \underline{Q}, \omega) \\ \varepsilon(\underline{q} - \underline{Q}, \underline{q}, \omega) & \varepsilon(\underline{q} - \underline{Q}, \underline{q} - 2\underline{Q}, \omega) & \varepsilon(\underline{q} - \underline{Q}, \underline{q} - \underline{Q}, \omega) \end{pmatrix}$$

und bilden analog die Matrix $\underline{R}(\underline{q}, \omega)$ aus den Elementen $R_{oo}(\underline{q}, \underline{q}', \omega)$, ebenso die diagonale Matrix

$$\underline{v}(\underline{q}) = \begin{pmatrix} v(\underline{q}) & 0 & 0 \\ 0 & v(\underline{q} - 2\underline{Q}) & 0 \\ 0 & 0 & v(\underline{q} - \underline{Q}) \end{pmatrix}$$

mit $v(\underline{q}) = \frac{\sqrt{4\pi e^2}}{|\underline{q}|}$

Indem wir in den Glg. (A.1d) und (A.3) nur die Werte $\underline{q}' = \underline{q}, \underline{q} - \underline{Q}, \underline{q} - 2\underline{Q}$ zulassen, erhalten wir in Matrixform

$$\begin{aligned} \underline{D} &= \underline{\varepsilon} \underline{E} \\ \underline{E} &= \left\{ 1 + \underline{v} \frac{1}{e^2} \underline{R} \underline{v} \right\} \underline{D} \end{aligned}$$

Daraus folgt

$$\underline{\underline{\epsilon}} = \left\{ 1 + \underline{\underline{v}} \frac{1}{e^2} \underline{\underline{R}} \underline{\underline{v}} \right\}^{-1} \quad (\text{A.4})$$

Die (3,3)-Komponente der Matrix $\underline{\underline{\epsilon}}(2k_F, \omega)$ ist die uns interessierende dielektrische Funktion $\epsilon(0,0,\omega)$, bei deren Berechnung die erwähnten Fourierkomponenten $\underline{\underline{q}} = 0, \pm(Q_x, Q_y, 2k_F)$ zugelassen sind.

Die anschließende Berechnung der Responsefunktion orientiert sich an Kapitel 8 aus Schrieffer /6/, teilweise wird seine Nomenklatur verwendet.

Die elektronischen Wellenfunktionen sind beschrieben durch die Peierlszustände $\psi_{\underline{k}}(\underline{r}) = \langle \underline{r} | \underline{k} \rangle_P$ (S. 12), mit Erzeugern $c_{\underline{k}}^+$ und Vernichtern $c_{\underline{k}}$.

Ihre Verbindung zu Erzeugern $a_{\underline{k}}^+$ bzw. Vernichtern $a_{\underline{k}}$ ebener Wellen

$$\psi_{\underline{k}}^0 = \langle \underline{r} | \underline{k} \rangle_E = e^{i\underline{k}\underline{r}} \text{ ist}$$

$$c_{\underline{k}} = \sum_{\underline{k}'} \langle \underline{k} | \underline{k}' \rangle_E a_{\underline{k}'}$$

$$c_{\underline{k}}^+ = \sum_{\underline{k}'} \langle \underline{k}' | \underline{k} \rangle_P a_{\underline{k}}^+$$

Ein äußeres elektromagnetisches Feld $A(\underline{r}, t)$

$$A_{\underline{\mu}}(\underline{r}, t) = \begin{cases} A_{\underline{\mu}}(\underline{r}, t) & \mu = 1, 2, 3 \\ c\phi(\underline{r}, t) & \mu = 0 \end{cases} \quad (\text{A.5})$$

mit dem Vektorpotential \underline{A} und skalaren Potential ϕ , induziert einen Strom $\underline{j}_{\underline{\mu}}(\underline{r}, t)$

$$\underline{j}_{\underline{\mu}}(\underline{r}, t) = \begin{cases} \underline{j}_{\underline{\mu}}(\underline{r}, t) & \mu = 1, 2, 3 \\ -e\rho(\underline{r}, t) & \mu = 0 \end{cases} \quad (\text{A.6})$$

dessen Erwartungswert $J_{\underline{\mu}}(\underline{r}, t) = \langle \underline{j}_{\underline{\mu}}(\underline{r}, t) \rangle$ in linearer Entwicklung nach $A_{\underline{\mu}}(\underline{r}, t)$ sich schreiben läßt als (Metrik (-1,1,1,1) für Summen über μ und ν)

$$J_{\underline{\mu}}(\underline{r}, t) = -\frac{c}{4\pi} \sum_{\nu} \int d\underline{r}' dt' K_{\underline{\mu}\nu}(\underline{r}, \underline{r}', t - t') A_{\nu}(\underline{r}', t')$$

Der elektromagnetische Kern $K_{\mu\nu}(\underline{r}, \underline{r}', t - t')$ ist gegeben durch

$$K_{\mu\nu}(\underline{r}, \underline{r}', t) = -\frac{4\pi i}{c^2} \langle 0 | \left[j_{\mu}^P(\underline{r}, t), j_{\nu}^P(\underline{r}', 0) \right] | 0 \rangle \theta(t) \\ - \frac{4\pi e}{mc^2} \langle 0 | \rho(\underline{r}, t) | 0 \rangle \delta(\underline{r} - \underline{r}') \delta_{\mu\nu} (1 - \delta_{\nu 0}) \delta(t)$$

(vgl. /6/) $|0\rangle$ ist der Grundzustand des bez. A ungestörten Systems.

Dabei ist (ohne Spinindices)

$$j_{\mu}^P(\underline{r}, t) = \begin{cases} -\frac{e}{2mi} \{ \hat{\psi}^+(\underline{r}, t) \nabla_{\mu} \hat{\psi}(\underline{r}, t) - (\nabla_{\mu} \hat{\psi}^+(\underline{r}, t)) \hat{\psi}(\underline{r}, t) \} & \mu = 1, 2, 3 \\ -e \hat{\psi}^+(\underline{r}, t) \hat{\psi}(\underline{r}, t) & \mu = 0 \end{cases}$$

mit den Feldoperatoren $\hat{\psi}(\underline{r}, t) = \sum_{\underline{k}} \psi_{\underline{k}}(\underline{r}) c_{\underline{k}}(t)$ und ihren komplex konjugierten.

Durch Fouriertransformation erhält man:

$$J_{\mu}(\underline{q}, \omega) = -\frac{c}{4\pi} \sum_{\nu=0}^3 \sum_{\underline{q}'} K_{\mu\nu}(\underline{q}, \underline{q}', \omega) A_{\nu}(\underline{q}', \omega) \quad (\text{A.7a})$$

$$K_{\mu\nu}(\underline{q}, \underline{q}', \omega) = \frac{4\pi}{c^2} R_{\mu\nu}(\underline{q}, \underline{q}', \omega) + \frac{4\pi e^2}{mc^2} \delta_{\mu\nu} (1 - \delta_{\nu 0}) \sum_{\underline{k}} \langle \underline{k} | e^{-i(\underline{q}-\underline{q}')\underline{r}} | \underline{k} \rangle \langle 0 | c_{\underline{k}}^+ c_{\underline{k}} | 0 \rangle \quad (\text{A.7b})$$

$$\left. \begin{matrix} \text{Re} \\ \text{Im} \end{matrix} \right\} R_{\mu\nu}(\underline{q}, \underline{q}', \omega) = \text{sign}\omega \cdot \left. \begin{matrix} \text{Re} \\ \text{Im} \end{matrix} \right\} \int dt e^{+i\omega t} (-i) \langle 0 | T \{ j_{\mu}^P(\underline{q}, t) j_{\nu}^P(-\underline{q}', 0) \} | 0 \rangle \quad (\text{A.7c})$$

Die Stromoperatoren $j_{\mu}^P(\underline{q}, t)$ sind

$$j_{\mu}^P(\underline{q}, t) = -e \sum_{\underline{k}, \underline{1}} c_{\underline{k}}^+(t) c_{\underline{1}}(t) \cdot \eta_{\mu}(\underline{k}, \underline{1}, \underline{q}) \quad (\text{A.8a})$$

$$\eta_{\mu}(\underline{k}, \underline{1}, \underline{q}) = \begin{cases} \frac{1}{m} \sum_{\underline{a}} \langle \underline{k} | \underline{a} \rangle_E \left(\underline{a} + \frac{\underline{q}}{2} \right)_{\mu} \langle \underline{a} + \underline{q} | \underline{1} \rangle_P & \mu = 1, 2, 3 \\ \langle \underline{k} | e^{-i\underline{q}\underline{r}} | \underline{1} \rangle & \mu = 0 \end{cases} \quad (\text{A.8b})$$

(m = Elektronenmasse).

Gleichung (A.7) beschreibt den gesuchten Zusammenhang von externem Potential $\phi(\underline{q}, \omega)$ und induzierter Ladung $J_0(\underline{q}, \omega) \equiv -e\rho(\underline{q}, \omega)$ (vgl. (A.2)):

$$J_0(\underline{q}, \omega) = \frac{c^2}{4\pi} \sum_{\underline{q}'} K_{00}(\underline{q}, \underline{q}', \omega) \phi(\underline{q}', \omega) \\ = \sum_{\underline{q}'} R_{00}(\underline{q}, \underline{q}', \omega) \phi(\underline{q}', \omega) \quad (\text{A.9})$$

Die zeitgeordnete Korrelationsfunktion

$$P_{\mu\nu}(\underline{q}, \underline{q}', \omega) = \int dt e^{i\omega t} (-i) \langle 0 | T \{ j_{\mu}^P(\underline{q}, t) j_{\nu}^P(-\underline{q}', 0) \} | 0 \rangle$$

ist der Ausgangspunkt einer Störungsrechnung nach den internen Wechselwirkungen des Peierlssystems.

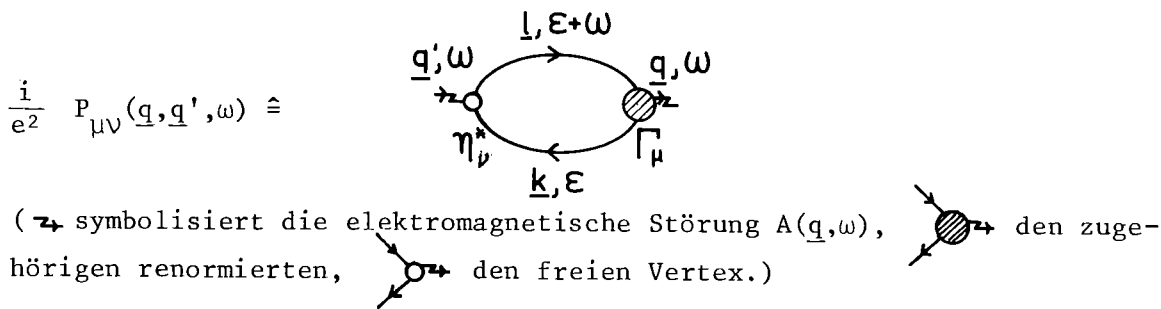
Es läßt sich zeigen, daß $P_{\mu\nu}(\underline{q}, \underline{q}', \omega)$ mit Hilfe der exakten Elektron-Greenfunktion

$$G(\underline{k}, \omega) = \int dt e^{i\omega t} (-i) \langle 0 | T c_{\underline{k}}(t) c_{\underline{k}}^+(0) | 0 \rangle$$

und des "freien" Vertex $\eta_{\mu}(\underline{k}, \underline{l}, \underline{q})$ sich schreiben läßt als

$$P_{\mu\nu}(\underline{q}, \underline{q}', \omega) = -i e^2 \sum_{\underline{k}, \underline{l}} \Gamma_{\mu}(\underline{k}, \underline{l}, \underline{q}) G(\underline{k}, \varepsilon) \eta_{\nu}^*(\underline{k}, \underline{l}, \underline{q}') G(\underline{l}, \varepsilon + \omega) \quad (\text{A.10})$$

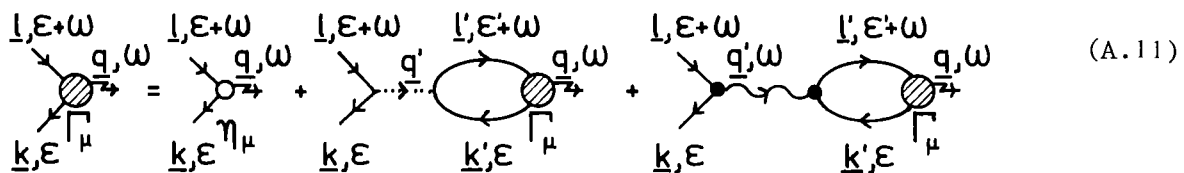
mit einer "renormierten Vertexfunktion" $\Gamma_{\mu}(\underline{k}, \underline{l}, \underline{q}; \omega)$. Diese Gleichung ist in graphischer Form:



Da wir weder die Greenfunktion $G(\underline{k}, \omega)$ noch den renormierten Vertex $\Gamma_{\mu}(\underline{k}, \underline{l}, \underline{q}; \omega)$ exakt angeben können, approximieren wir diese Größen in RPA, indem wir

$$G(\underline{k}, \omega) = G^0(\underline{k}, \omega) = [\omega - E_{\underline{k}} + i\delta]^{-1}$$

setzen und $\Gamma_{\mu}(\underline{k}, \underline{l}, \underline{q}; \omega)$ durch die Dysongleichung



definieren. Ein wichtiges physikalisches Kriterium für eine solche störungstheoretische Entwicklung des elektromagnetischen Kerns ist es, eine ladungserhaltende und eichinvariante Näherung zu verwenden. Dies ist gewährleistet, falls $G(\underline{k}, \omega)$ und $\Gamma(\underline{k}, \underline{l}, \underline{q}; \omega)$ eine aus dieser Forderung abgeleitete Gleichung, die sogenannte "Ward-Identität", erfüllen. Diese nimmt in unserem Peierlssystem die Gestalt

$$P_{\underline{k}} \langle e^{-i\underline{q} \cdot \underline{r}} | \underline{l} \rangle_P \left(\frac{1}{G(\underline{k}, \varepsilon)} - \frac{1}{G(\underline{l}, \varepsilon + \omega)} \right) = \underline{q} \cdot \underline{\Gamma}(\underline{k}, \underline{l}, \underline{q}; \omega) - \omega \Gamma_0(\underline{k}, \underline{l}, \underline{q}; \omega) \quad \text{an.}$$

Dabei haben wir den Vierer-Vektor $\underline{\Gamma}$ in $\underline{\Gamma} = (\Gamma_1, \Gamma_2, \Gamma_3)$ und Γ_0 aufgespalten.

Um zu zeigen, daß der freie Vertex η_μ zusammen mit G^0 die Ward-Identität erfüllt, formen wir $\underline{q} \cdot \underline{\eta}$ um: ($\underline{\eta} = (\eta_1, \eta_2, \eta_3)$)

$$\begin{aligned} \underline{q} \cdot \underline{\eta}(\underline{k}, \underline{l}, \underline{q}) &= \sum_{\underline{a}} \langle \underline{k} | \underline{a} \rangle_{\underline{P}} \langle \underline{a} + \underline{q} | -\frac{\nabla^2}{2m} | \underline{l} \rangle_{\underline{P}} - \langle \underline{k} | -\frac{\nabla^2}{2m} | \underline{a} \rangle_{\underline{P}} \langle \underline{a} + \underline{q} | \underline{l} \rangle_{\underline{P}} \\ &= \langle \underline{k} | e^{-i\underline{q}\underline{r}} \left[\left(-\frac{\nabla^2}{2m} + U_{\underline{o}}^{\underline{P}}(\underline{r}) + U_{\underline{o}}^{\underline{J}}(\underline{r}) \right) - \left(-\frac{\nabla^2}{2m} + U_{\underline{o}}^{\underline{P}}(\underline{r}) + U_{\underline{o}}^{\underline{J}}(\underline{r}) \right) \right] e^{-i\underline{q}\underline{r}} | \underline{l} \rangle_{\underline{P}} \\ &= (E_{\underline{l}} - E_{\underline{k}}) \langle \underline{k} | e^{-i\underline{q}\underline{r}} | \underline{l} \rangle_{\underline{P}} \end{aligned}$$

da für die Peierlszustände $| \underline{k} \rangle_{\underline{P}}$ die Eigenwertgleichung (vgl. Glg. (3.15))

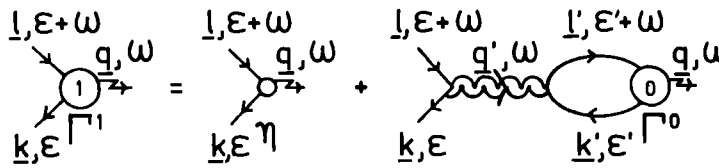
$$\left(-\frac{\nabla^2}{2m} + U_{\underline{o}}^{\underline{J}}(\underline{x}, \underline{y}) + U_{\underline{o}}^{\underline{P}}(\underline{r}) \right) | \underline{k} \rangle_{\underline{P}} = E_{\underline{k}} | \underline{k} \rangle_{\underline{P}}$$


gilt. Daraus folgt die Behauptung.

Für den durch Glg. (A. 11) definierten Vertex Γ zeigen wir die Ward-Identität iterativ (vgl. /5/)

0)  (A.12a)

Ward-Identität wurde soeben gezeigt.

1)  (A.12b)

( $\hat{=}$ Phonon + Kopplungskonstanten oder Elektron-Elektron-Wechselwirkung.)

Übersetzt führt dies zur rechten Seite der Ward-Identität

$$\begin{aligned} \underline{q}\underline{\Gamma}^1 - \omega \underline{\Gamma}_0^1 &= \underline{q}\underline{\eta} - \omega \eta_0 \\ &+ A \int d\underline{k}' \int d\underline{l}' \int d\varepsilon' \left[\underline{q}\underline{\eta}(\underline{k}', \underline{l}', \underline{q}) - \omega \eta_0(\underline{k}', \underline{l}', \underline{q}) \right] G(\underline{l}', \varepsilon' + \omega) \langle \underline{k}' | e^{-i\underline{q}'\underline{r}} | \underline{l}' \rangle G(\underline{k}', \varepsilon) \\ &= \langle \underline{k} | e^{-i\underline{q}\underline{r}} | \underline{l} \rangle \left[\frac{1}{G(\underline{k}, \varepsilon)} - \frac{1}{G(\underline{l}, \varepsilon + \omega)} \right] \\ &+ A \int d\underline{k}' \int d\underline{l}' \int d\varepsilon' \langle \underline{k}' | e^{-i\underline{q}\underline{r}} | \underline{l}' \rangle \langle \underline{l}' | e^{i\underline{q}'\underline{r}} | \underline{k}' \rangle \left[G(\underline{l}', \varepsilon' + \omega) - G(\underline{k}', \varepsilon') \right] \\ &= \langle \underline{k} | e^{-i\underline{q}\underline{r}} | \underline{l} \rangle \left[\frac{1}{G(\underline{k}, \varepsilon)} - \frac{1}{G(\underline{l}, \varepsilon + \omega)} \right] \\ &+ A \int d\underline{l}' \int d\varepsilon' \langle \underline{k}' | e^{i(\underline{q}' - \underline{q})\underline{r}} | \underline{l}' \rangle G(\underline{l}', \varepsilon' + \omega) \\ &- A \int d\underline{k}' \int d\varepsilon' \langle \underline{k}' | e^{i(\underline{q}' - \underline{q})\underline{r}} | \underline{k}' \rangle G(\underline{k}', \varepsilon') \\ &= \langle \underline{k} | e^{-i\underline{q}\underline{r}} | \underline{l} \rangle \left[G^{-1}(\underline{k}, \varepsilon) - G^{-1}(\underline{l}, \varepsilon + \omega) \right] \quad \equiv \quad \text{linke Seite.} \end{aligned}$$

(A soll die separablen, nicht $(\underline{k}', \underline{l}', \varepsilon)$ -abhängigen Faktoren des 2. Summanden in Glg. (A.12b) symbolisieren.) Auch Γ^1 erfüllt also die Ward-Identität.

Für den n-ten Schritt

läßt sich die Ward-Identität analog verifizieren. Für $n \rightarrow \infty$ folgt dann die Erfüllung der "Ward-Identität" durch $G = G^0$ und den Vertex $\Gamma^\infty \equiv \Gamma$,
 Glg. (A.11): RPA genügt der Ward-Identität also auch bei Einschluß anomaler Terme mit $\underline{q}' \neq \underline{q}$.

In dieser Näherung gilt also

Dies fassen wir auf andere Weise zusammen:

(A.13a)

(A.13b)

(A.13c)

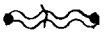
In diesen Gleichungen haben wir die Frequenzvariablen unterdrückt. Im folgenden kehren wir zur adiabatischen Näherung zurück. (A.13) verarbeiten wir mit Matrizen.

Analog zur Matrix $\underline{\varepsilon}(\underline{q}, \omega)$, Seite A2, definieren wir $\underline{\Pi}(\underline{q})$ mit den Elementen ⁺⁾

$$\begin{aligned}
 -i\Pi(\underline{q}, \underline{q}') &\hat{=} \text{Diagram: } \underline{q} \xrightarrow{\underline{l}, \varepsilon} \text{circle} \xrightarrow{\underline{k}, \varepsilon} \underline{q}' \\
 &= 2 \sum_{\underline{k}} \sum_{\underline{l}} \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} \langle \underline{l} | e^{i\underline{q}\underline{r}} | \underline{k} \rangle G(\underline{l}, \varepsilon) \langle \underline{k} | e^{-i\underline{q}'\underline{r}} | \underline{l} \rangle G(\underline{k}, \varepsilon)
 \end{aligned}$$

In der Matrix

$$\underline{id}^0(\underline{q}, \omega) \hat{=} \begin{pmatrix} \text{Diagram: } \underline{q}, \omega & 0 & 0 \\ 0 & \text{Diagram: } \underline{q}-2\underline{Q}, \omega & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

sind der freie Phononenpropagator und der nur \underline{q} -abhängige, nicht in Π berücksichtigte Anteil der Elektron-Phonon-Kopplungskonstante zusammengefasst. Analog definieren wir die Matrix $\underline{d}(\underline{q}, \omega)$, die die Propagatoren  enthält. Die Elektron-Elektron-Wechselwirkung wird schließlich in der Diagonalmatrix

$$\underline{V}(\underline{q}) = \begin{pmatrix} V_{\underline{q}} & 0 & 0 \\ 0 & V_{\underline{q}-2\underline{Q}} & 0 \\ 0 & 0 & V_{\underline{q}-\underline{Q}} \end{pmatrix}$$

mit $\dots \hat{=} -iV_{\underline{q}} = -i \frac{4\pi e^2}{\underline{q}^2}$ berücksichtigt. (ε_{\parallel} , ε_{\perp} setzen wir in diesem Anhang gleich Eins.)

Damit können wir die Gleichung (A.13) übersetzen und summieren ($\omega > 0$):

$$(A.13a): \quad \frac{i}{e^2} \underline{R} = -i \underline{\Pi}^d (1 + \underline{V} \underline{\Pi}^d)^{-1}$$

(Für $\omega > 0$ ist $R_{oo}(\underline{q}, \underline{q}', \omega) = P_{oo}(\underline{q}, \underline{q}', \omega)$, Glg. (A.7c))

$$(A.13b): \quad \underline{\Pi}^d = \underline{\Pi} + \underline{\Pi} \underline{d} \underline{\Pi}$$

$$(A.13c): \quad \underline{d} = (1 - \underline{d}^0 \underline{\Pi})^{-1} \underline{d}^0$$

(Da $\eta_o(\underline{k}, \underline{l}, \underline{q}) = \langle \underline{k} | e^{-i\underline{q}\underline{r}} | \underline{l} \rangle$ ist, Glg. (A.8b), ist dieser Vertex in der Definition von $\Pi(\underline{q}, \underline{q}')$ bereits enthalten und liefert keinen zusätzlichen Faktor.)

⁺⁾ Die folgenden Definitionen unterscheiden sich etwas von denen im Hauptteil der Arbeit.

Mit (A.4) ist dann

$$\begin{aligned} \underline{\varepsilon}^{-1} &= 1 - \underline{v} \underline{\Pi}^d (1 + \underline{v} \underline{\Pi}^d)^{-1} \underline{v} \\ &= \underline{v}^{-1} \{1 - \underline{v} \underline{\Pi}^d (1 + \underline{v} \underline{\Pi}^d)^{-1}\} \underline{v} \\ &= \underline{v}^{-1} (1 + \underline{v} \underline{\Pi}^d)^{-1} \underline{v} \end{aligned}$$

(Wir haben $\underline{v} \cdot \underline{v} = \underline{V}$ benutzt.) Weiter ist

$$\begin{aligned} \underline{\varepsilon} &= \underline{v}^{-1} (1 + \underline{v} \underline{\Pi}^d) \underline{v} \\ &= 1 + \underline{v} \underline{\Pi}^d \underline{v} \end{aligned}$$

Ein Diagonalelement $\varepsilon(\underline{q}, \underline{q}, \omega)$ von $\underline{\varepsilon}$ ist gegeben durch

$$\varepsilon(\underline{q}, \underline{q}, \omega) = 1 + v(\underline{q}) \Pi^d(\underline{q}, \underline{q}, \omega) v(\underline{q}) = 1 + V(\underline{q}) \Pi^d(\underline{q}, \underline{q}, \omega)$$

In Diagrammen ausgedrückt (ohne Frequenzvariable):

$$\varepsilon(\underline{q}, \underline{q}, \omega) = 1 + i^2 \xrightarrow{V_{\underline{q}}} \left(\begin{array}{c} \text{q} \rightarrow \text{q} \\ \text{q} \rightarrow \text{q}' \text{---} \text{q}'' \rightarrow \text{q} \end{array} \right)$$

Für Diagonalelemente von $\underline{\varepsilon}$, die $\varepsilon(\underline{q}, \underline{q}, \omega)$, ist also nur die Fourierkomponente $V_{\underline{q}}$ maßgebend. Anomale Terme treten nur im Phononanteil auf.

Zur Ermittlung der Gleichstromleitfähigkeit interessiert uns

$\varepsilon(\underline{q} = 0, \underline{q} = 0, \omega)$:

$$\varepsilon(0, 0, \omega) = 1 + i^2 \xrightarrow{V_0} \left(\begin{array}{c} \text{q}=0 \rightarrow \text{q}=0 \\ \text{q}=0 \rightarrow \pm 2k_F \text{---} \pm 2k_F \rightarrow \text{q}=0 \end{array} \right)$$

Es treten die renormierten $2k_F$ -Phononen, aber nur $V_{\underline{q}} \approx 0$ auf. Damit stellt sich heraus, daß auch bei Berücksichtigung mehrerer Fourierkomponenten der Elektron-Elektron-Wechselwirkung bei der Berechnung der dielektrischen Funktion für dieses Diagonalelement nur $V_{\underline{q}} = 0$ eingeht. Damit behält das Ergebnis von Schuster /5/ seine Gültigkeit, wonach (s.Glg. (9.8))

$$\varepsilon(q \approx 0, q \approx 0, \omega) = \varepsilon_{\infty} \frac{\omega^2 - \omega_L^2}{\omega^2 - \omega_T^2 + i\delta} \quad \text{ist.}$$

Die Nullstelle und die Polstelle dieses Matrixelements sind also durch Frequenzen gegeben, die in Systemen, in denen auch die Komponenten V_{+2k_F} der Elektron-Elektron-Wechselwirkung eine Rolle spielen, nicht den "wahren" Phononfrequenzen entsprechen.

Daraus folgt, daß die Fröhlich-Supraleitung durch Coulombkräfte allein, wie zu erwarten ist, nicht zerstört wird. Denn da die Polstelle der obigen ϵ -Funktion nach wie vor bei $\omega = \omega_T$ ($= 0$ für Jellium) liegt, gilt für den Imaginärteil dieser Funktion und damit den Realteil der daraus abgeleiteten Leitfähigkeit:

$$\text{Re } \sigma(\underline{q} = 0, \underline{q} = 0, \omega) = \frac{\omega}{4\pi} \text{Im } \epsilon(\underline{q} = 0, \underline{q} = 0, \omega) \sim \delta(\omega).$$

Um jedoch Aussagen über das elektromagnetische Spektrum und damit über die optischen Eigenschaften des Peierlssystems machen zu können, benötigen wir die gesamte dielektrische Matrix. Denn diese Anregungen werden durch die Maxwellgleichungen zusammen mit der Materialgleichung

$$\underline{D}(\underline{q}, \omega) = \sum_{\underline{q}'} \epsilon(\underline{q}, \underline{q}', \omega) \underline{E}(\underline{q}', \omega)$$

in Form eines linearen Gleichungssystems in $\underline{E}(\underline{q}', \omega)$ bestimmt, dessen Koeffizienten im wesentlichen durch die $\epsilon(\underline{q}, \underline{q}', \omega)$ gegeben sind. Darauf soll hier aber nicht näher eingegangen werden. Wir betrachten lediglich noch den Fall eines Kettensystems mit statistisch verteilten Überstrukturphasen. Dann wird die Matrix $\underline{\epsilon}$ zur Diagonalmatrix, da die anomalen Polarisationsbeiträge verschwinden (Abschnitt 11). Die optischen Eigenschaften bestimmt nun allein $\epsilon(\underline{q} \approx 0, \underline{q} \approx 0, \omega)$. Wie wir aus der graphischen Darstellung dieses Matrixelements jedoch sehen, trägt die Phasenmode nur aufgrund anomaler Polarisationssterme bei. Wir erwarten deswegen das Verschwinden der optischen Aktivität dieser Mode, falls die Interketten-Phasenkorrelation verlorenght.

Anmerkung: Alle Rechnungen wurden für longitudinale Felder durchgeführt. Für optische Reflektion ist jedoch die Antwortfunktion $\epsilon_{\perp}(\omega)$ auf transversale Felder angebracht. Wir rechtfertigen uns damit, daß für feste Polarisationsrichtung (da unser Kristall anisotrop ist) im Punkt $\underline{q} = 0$ $\epsilon_{\perp}(\omega)$ und $\epsilon_{\parallel}(\omega)$ identisch sind.

Literaturverzeichnis

- /1/ H.R. Zeller, Electronic Properties of One-Dimensional Solid State Systems Festkörperprobleme XIII, Pergamon-Vieweg Verlag (1973)
- /2/ W. Kohn, Image of the Fermi Surface in the Vibration Spectrum of a Metal, Phys. Rev. Lett. 2, S. 393 (1959)
A.M. Afanas'ev and Yu. Kagan, Singularities Caused by Electron-Phonon Interaction in the Phonon Dispersion Law, Sov. Phys. JETP 16, S. 1030 (1963)
- /3/ M.J. Rice and S. Strässler, Theory of a Quasi-One-Dimensional Band-Conductor, Solid State Commun. 13, S. 125 (1973)
- /4/ R.E. Peierls, Quantum Theory of Solids, Clarendon Press, Oxford (1965)
- /5/ H.G. Schuster, Electromagnetic excitation spectrum of the Peierls Phase, Phys. Rev. B11, S. 613 (1975)
- /6/ J.R. Schrieffer, Theory of Superconductivity, W.A. Benjamin Inc. (1964)
- /7/ H. Fröhlich, On the theory of superconductivity: the one-dimensional case, Proc. Roy. Soc. London A 223, S. 296 (1954)
- /8/ P.A. Lee, T.M. Rice and P.W. Anderson, Conductivity from Charge or Spin Density Waves, Solid State Commun. 14, S. 703 (1974)
- /9/ L.D. Landau and E.M. Lifschitz, Statistical Physics, Pergamon Press (1960)
- /10/ P.A. Lee, T.M. Rice and P.W. Anderson, Fluctuation Effects at a Peierls Transition, Phys. Rev. Lett. 31, S. 462 (1973)
M.J. Rice and S. Strässler, Effects of Fluctuations and Interchain Coupling on the Peierls Transition, Solid State Commun. 13, S. 1389 (1973)
W. Dieterich, Three-Dimensional Ordering in Weakly Coupled Linear Conductors, in H.G. Schuster ed., One-Dimensional Conductors, Springer-Verlag (1975)
- /11/ R. Comès, M. Lambert, H. Launois and H.R. Zeller, Evidence for a Peierls Distortion or a Kohn Anomaly in One-Dimensional Conductors of the Type $K_2Pt(CN)_4Br_{0.3} \cdot xH_2O$, Phys. Rev. B8, 571 (1973)
B. Renker, L. Pintschovius, W. Gläser, H. Rietschel, R. Comès, L. Liebert and W. Drexel, Neutron Scattering Study of the Structural Phase Transition in the One-Dimensional Conductor $K_2Pt(CN)_4Br_{0.3} \cdot 3D_2O$, Phys. Rev. Lett 32, S. 836 (1974)
- /12/ J.W. Lynn, M. Iizumi, G. Shirane, S.A. Werner and R.D. Saillant, Neutron-scattering study of the "one-dimensional" conductor $K_2Pt(CN)_4Br_{0.3} \cdot 3.2D_2O$ (KCP), Phys. Rev. B12, S. 1154 (1975)
- /13/ B. Renker, private Mitteilung
- /14/ L.J. Sham and B.R. Patton, Theory of Structural Variation in a Quasi-One-Dimensional Conductor, Phys. Rev. Lett. 36, S. 733 (1976)

- /15/ B. Renker, H. Rietschel, L. Pintschovius, W. Gläser, P. Bruesch, D. Kuse and M.J. Rice, Observation of Giant Kohn Anomaly in the One-Dimensional Conductor $K_2Pt(CN)_4Br_{0.3} \cdot 3H_2O$, Phys. Rev. Lett. 30, S. 1144 (1973)
- /16/ R. Comès, B. Renker, L. Pintschovius,, R. Currat, W. Gläser and G. Scheiber, Inelastic Neutron Scattering Study of the $2k_F$ -Instability in $K_2Pt(CN)_4Br_{0.3} \cdot xD_2O$ (KCP), phys. stat. sol. (b)71, 171 (1975)
- K. Carneiro, G. Shirane, S.A. Werner and S. Kaiser, Lattice dynamics of $K_2Pt(CN)_4Br_{0.3} \cdot 3.2D_2O$ (KCP) studied by inelastic neutron scattering, Phys. Rev. B13, S. 4258 (1976)
- /17/ P. Bruesch, S. Strässler und H.R. Zeller, Fluctuations and order in a one-dimensional system. A spectroscopical study of the Peierls transition in $K_2Pt(CN)_4Br_{0.3} \cdot 3(H_2O)$, Phys. Rev. B12, 219 (1975)
- /18/ P. Bruesch, Optical Properties of the One-Dimensional Pt-Complex Compounds, in H.G. Schuster ed., One-Dimensional Conductors, Springer-Verlag (1975)
- /19/ E. Waschkies, Phononendispersion eines Peierls-verzerrten ein-dimensionalen Metalls bei $T = 0^o$ K, Diplomarbeit, Universität Karlsruhe (1974)
- /20/ R.C. Jaklevic and R.B. Saillant, Observation of Elektromagnetic Resonances in Crystals of $K_2Pt(CN)_4Br_{0.3} \cdot 3H_2O$ at Microwave Frequencies, Solid State Commun. 15, S. 307 (1974)
- /21/ P.F. Williams and A.N. Bloch, Self-consistent dielectric response of a quasi-one-dimensional metal at high frequencies, Phys. Rev. B10, S. 1097 (1974)
- /22/ C. Kittel, Quantum Theory of Solids, John Wiley & Sons Inc., 3. Auflage (1966)
- /23/ M. Born and K. Huang, Dynamical Theory of Crystal Lattices, Clarendon Press, Oxford (1954)
- /24/ D. Pines, Elementary Excitations in Solids, W.A. Benjamin Inc. (1964)
- /25/ C.F. Eagen, S.A. Werner and R.B. Saillant, Amplitude and nature of the charge-density-wave displacements in $K_2Pt(CN)_4Br_{0.3} \cdot 3.2D_2O$ (KCP) at low temperatures, Phys. Rev. B12, S. 2036 (1975)
- /26/ H. Rietschel, The Giant Kohn Phonon Anomaly in a Peierls Semiconductor, Solid State Commun. 13, S. 1859 (1973)
- /27/ H. Rietschel, Cubic and Quartic Anharmonicities in a One-Dimensional Metal, Solid State Commun. 14, S. 699 (1974)

D a n k s a g u n g

Herrn Prof. Dr. H. Rietschel danke ich für die Themenstellung und ständige Betreuung dieser Arbeit, die am Institut Laue-Langevin in Grenoble begonnen und am Institut für Angewandte Kernphysik im Kernforschungszentrum Karlsruhe durchgeführt wurde.

Herrn Dr. Renker bin ich für zahlreiche anregende Diskussionen dankbar. Für aufschlußreiche Gespräche möchte ich auch den Herren Prof. Dr. R. v. Baltz, Prof. Dr. H.G. Schuster und Herrn Dr. W. Dieterich danken.

Für ihre technische Unterstützung bei der Anfertigung dieser Arbeit möchte ich Frau J. Steigleder, Frau M. Mackert und Herrn H. John herzlich danken.