第 45 卷 第 5 期 1996 年 5 月
1000-3290/96/45(05)/0844-06

物 理 学 报
ACTA PHYSICA SINICA

Vol. 45, No. 5, May, 1996
©1996 Chin. Phys. Soc.

MX 络合物中的晶格零点振动*

徐学通 于志刚 孙 鑫

(中国科学院红外物理国家重点实验室, 上海 200083;
复旦大学物理系, 李政道物理学综合实验室, 上海 200433)

(1994 年 11 月 11 日收到)

利用自洽重整化方法, 研究了不同电-声耦合作用下 *MX* 络合物中晶格零点振动对电荷密度波(CDW)的影响. 对聚乙炔, 无论电-声耦合作用强弱, 键序波(BOW)总存在. 而对 *MX* 络合物, 计算表明, 量子起伏对 CDW 的削弱作用依赖于电-声耦合作用的强弱. 当电-声耦合作用强时, CDW 的削弱小; 相反, 当电-声耦合作用弱时, CDW 削弱大, 甚至几乎被破坏. 这一差异来源于以下事实, 即在弱电-声耦合 λ 情况下, 聚乙炔中光学模声子频率随 $\sqrt{\lambda}$ 减小, 而在 *MX* 络合物中光学模声子频率与其裸值 ω_0 差异不大.

PACC: 7138; 7145L; 7215N

1 引 言

现在知道, 在共轭高聚物以及 *MX* 络合物等一类准一维体系中, 晶格零点振动对体系的 Peierls 基态有很大影响[1,2]. 因零点振动及热运动产生的电子局域态密度延伸至能隙间, 因而消除了电子态密度(DOS)在带边的反比平方根奇性, 这些特征在不同温度下的光吸收等实验中已得到了验证[3—5]. 荧光和喇曼光谱实验进一步表明 PtCl 络合物中的局域态主要来源于晶格零点振动, 而不是结构不均匀性[2], 而在聚乙炔中局域态效应主要起源于它的静态结构无序.

利用 SSH 哈密顿量[6], 已有许多不同的理论方法研究了共轭高聚物中的晶格量子起伏对 BOW 的影响[7—13]. 所有这些理论一致认为, 尽管晶格起伏强度可与晶格畸变强度比拟, 但是零点振动只对 BOW 的平均场强度产生很小的削弱. 另一种是一维分子晶体(MC)模型, 人们采用变分法[14]及 Monte Carlo 模拟[15]研究了晶格起伏对 CDW 的影响, 结果表明, 对自旋 1/2 的电子而言, 无论电-声(e-p)耦合作用多大, CDW 总是能够存在. 本文采用了自洽重整化模型计算了 *MX* 络合物中量子起伏对 CDW 的影响. 这一方法是由褚汉友及其合作者在解决 Fröhlich 极化子问题中首先提出的[16], 它避免了变分法中对波函数的假设以及 Monte Carlo 模拟中尺寸效应这些缺陷, 具有一定的优越性.

尽管 BOW 和 CDW 都产生于晶格二聚化, 二者仍有很大差别, 这一差别导致在共轭高聚物和 *MX* 络合物中的零点振动也不一样. 对聚乙炔, 由于高聚物链由相同的碳原子排列而成, SSH 哈密顿量具有平移不变性, 光学模声子只在二聚化以后才出现. 另一方

* 国家自然科学基金及新材料委员会资助的课题.

面，由于二聚化强度依赖于 e-p 耦合常数 λ，呼吸模（即波数 $q=0$ 的光学模声子）重整化后的声子频率 $\tilde{\omega}_0$ 随耦合常数 λ 降低而减小，$\tilde{\omega}_0 \sim \sqrt{\lambda}$[17]. 而对二聚化的量子起伏效应主要来自于呼吸模的零点振动，当 λ 减小时，BOW 强度和零点振动能 $\hbar\tilde{\omega}_0$ 同时减弱，所以即使在弱耦合极限下，BOW 仍能克服量子起伏的破坏作用而存在. MX 络合物则不一样，它由过渡金属原子 M 及卤素原子 X 交替排列而成，由于 X 次晶格的二聚化产生 CDW，X 次晶格自身没有平移不变性，因而 X 原子的振动无声学模声子，光学模声子频率重整化后，即使在弱耦合极限下，与裸值 ω_0 相比，减小不大. 因而，零点振动在弱耦合情况下无显著减小，但 X 次晶格的二聚化强度以及 CDW 强度都随耦合常数 λ 的降低而降低，因此，可以预料，在弱 e-p 耦合常数情况下，CDW 强度会由于零点振动的影响而严重削弱. 本文证明了这一预言，计算表明，如果 e-p 耦合作用很强，CDW 只是稍微削弱. 相反，如果 e-p 耦合作用很弱，CDW 几乎被零点振动所破坏.

2　方法与结果

MX 络合物晶体通常由弱耦合的线性链组成，每条线性链由交替的金属 M 原子和卤素 X 原子及连接于金属 M 的配位体排列而成. 一般而言，MX 络合物可由紧束缚两带模型正确描述，但由于本文主要关心晶格振动的量子起伏，为计算方便，我们采用不考虑电子-电子互作用的单带模型. 体系的哈密顿量为

$$H = -t\sum_l (c_{l\sigma}^{\dagger}c_{l+1\sigma} + \mathrm{H.c.}) + \frac{1}{2}\sum_l (\dot{Q}_l^2 + \omega_0^2 Q_l^2) + g\sum_{l\sigma}(Q_l - Q_{l-1})n_{l\sigma}, \quad (1)$$

其中 $c_{l\sigma}^{\dagger}(c_{l\sigma})$ 代表自旋 σ，位置 l 上电子的产生（湮没）算子，且 $n_{l\sigma} \equiv c_{l\sigma}^{\dagger}c_{l\sigma}$，$t$ 是相邻金属原子间的电荷转移能，ω_0 是卤素离子的声子频率，Q_l 是其正则坐标，描述 X 原子平行于链方向的运动，g 是 e-p 耦合常数.

根据 Peierls 定理，在基态，晶格发生二聚化，同时形成 CDW 态. 当体系处于 CDW 基态时，晶格声子发生凝聚，由于声子的量子性，移动声子场如下：

$$Q_l = (-1)^l Q_0 + \varphi_l, \quad (2)$$

Q_0 正是其基态的二聚化强度，其大小由条件 $\langle\varphi_l\rangle = 0$ 决定. 由方程(2)，体系的总哈密顿量成为

$$H = -t\sum_{l\sigma}(c_{l\sigma}^{\dagger}c_{l+1\sigma} + \mathrm{H.c.}) + 2gQ_0\sum_{l\sigma}(-1)^l n_{l\sigma} + \frac{1}{2}\sum_l(\dot{\varphi}_l^2 + \omega_0^2\varphi_l^2)$$
$$+ \omega_0^2 Q_0\sum_l(-1)^l\varphi_l + g\sum_{l\sigma}(\varphi_l - \varphi_{l-1})n_{l\sigma} + \frac{1}{2}N\omega_0^2 Q_0^2. \quad (3)$$

这样体系的晶格周期增倍，电子能带分裂为导带和价带. 动量空间的电子哈密顿量为

$$H_0^e = \sum_{k\sigma}(a_{1k\sigma}^{\dagger}\ a_{2k\sigma}^{\dagger})H_0^e(k)\begin{pmatrix} a_{1k\sigma} \\ a_{2k\sigma}\end{pmatrix}, \quad (4)$$

和

$$H_0^e(k) = 2\begin{pmatrix} t\sin k(c_k^2 - s_k^2) + 2gQ_0 s_k c_k & 2t\sin k s_k c_k - gQ_0(c_k^2 - s_k^2) \\ 2t\sin k s_k c_k - gQ_0(c_k^2 - s_k^2) & -t\sin k(c_k^2 - s_k^2) - 2gQ_0 s_k c_k \end{pmatrix}, \quad (5)$$

其中 s_k 和 c_k 分别代表 $\sin\theta_k$ 和 $\cos\theta_k$，e-p 互作用成为

$$
\begin{aligned}
H_i &= g\sum_{l\sigma}(\varphi_l - \varphi_{l-1})n_{l\sigma} \\
&= g\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{kk'\sigma}(a_{1k\sigma}^{\dagger}\, a_{2k\sigma}^{\dagger})S_1(k,k')\begin{pmatrix} a_{1k'\sigma} \\ a_{2k'\sigma}\end{pmatrix}(1-\mathrm{e}^{\mathrm{i}(k'-k)})\varphi(k-k') \\
&\quad + g\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{kk'\sigma}(a_{1k\sigma}^{\dagger}\, a_{2k\sigma}^{\dagger})S_2(k,k')\begin{pmatrix} a_{1k'} \\ a_{2k'}\end{pmatrix}(1+\mathrm{e}^{\mathrm{i}(k'-k)})\varphi(k-k'-\pi),
\end{aligned}
\tag{6}
$$

其中 $\varphi_l = \sum_q \mathrm{e}^{\mathrm{i}ql}\varphi(q)$. 方程(4)和(6)的详细推导过程以及 $S_1(k,k')$和 $S_2(k,k')$的定义见附录 A. 由于 e-p 耦合作用引起的电子自能为

$$
\begin{aligned}
\Sigma(k,k_0) = \frac{2g^2}{N\omega_0}\sum_{k'}\frac{1}{k_0^2-E^2}\{k_0 + E[\sin\varphi_k\sin\varphi_{k'} - \cos\varphi_k\cos\varphi_{k'}\cos(k'-k)]\tau_3 \\
- E[\cos\varphi_k\sin\varphi_{k'} + \sin\varphi_k\cos\varphi_{k'}\cos(k'-k)]\tau_1\},
\end{aligned}
\tag{7}
$$

其中 $E = \varepsilon_{k'} + \omega_0$，$\varepsilon_k$ 是重整化的电子能谱，将自洽地确定，$\varphi k = 2\theta_k$，τ_i 是泡利矩阵. 在壳上(on energy shell)方案下，

$$k_0 \to \varepsilon_k\tau_3.$$

我们得到

$$\Sigma(k) = (\alpha_k\varepsilon_k + \beta_k\sin\varphi_k + \gamma_k\cos\varphi_k)\tau_3 - (\beta_k\cos\varphi_k - \gamma_k\sin\varphi_k)\tau_1, \tag{8}$$

函数 α_k，β_k 和 γ_k 的表示式见附录 B. 这样，在动量空间中，重整化的电子哈密顿量

$$H^{\mathrm{eff}}(k) = H_0^{\mathrm{e}}(k) + \Sigma(k). \tag{9}$$

正如引言中所述，每个 X 原子有一固定中心，无平移不变性，当考虑 e-p 耦合作用后，MX 络合物中的声子频率改变并不大，所以我们在计算中忽略了声子模的重整化. 函数 $\sin\varphi_k$，$\cos\varphi_{k'}$和电子能谱 ε_k 可自洽地确定，将重整化的电子哈密顿量对角化，即

$$H^{\mathrm{eff}}(k) = \varepsilon_k\tau_3. \tag{10}$$

我们得到

$$\varepsilon_k = \alpha_k\varepsilon_k + (2gQ_0 + \beta_k)\sin\varphi_k + (2t\sin k + \gamma_k)\cos\varphi_k, \tag{11}$$

$$(2gQ_0 + \beta_k)\cos\varphi_k + (-2t\sin k - \gamma_k)\sin\varphi_k = 0, \tag{12}$$

和

$$\cos\varphi_k = \frac{\gamma_k + 2t\sin k}{\sqrt{(2gQ_0+\beta_k)^2 + (\gamma_k + 2t\sin k)^2}}, \tag{13}$$

$$\sin\varphi_k = \frac{2gQ_0 + \beta_k}{\sqrt{(2gQ_0+\beta_k)^2 + (\gamma_k + 2t\sin k)^2}}, \tag{14}$$

$$\varepsilon_k = \sqrt{(2gQ_0+\beta_k)^2 + (\gamma_k + 2t\sin k)^2}/(1-\alpha_k). \tag{15}$$

利用条件$\langle\varphi_l\rangle = 0$ 决定二聚化强度 Q_0，公式如下

$$\omega_0^2 Q_0 = -\frac{2g}{N}\sum_{l\sigma}\langle(-1)^l n_{l\sigma}\rangle = 4g\int \mathrm{d}k\,\sin\varphi_k. \tag{16}$$

令 $\beta_k = 2\bar{\beta}_k$ 和 $\gamma_k = 2\bar{\gamma}_k\sin k$，获得五个自洽方程：

$$\alpha_k = \frac{g^2}{\pi\omega_0}\int\frac{\mathrm{d}k'}{\epsilon_k^2 - (\epsilon_{k'} + \omega_0)^2}, \tag{17}$$

$$\bar{\beta}_k = \frac{g^2}{2\pi\omega_0}\int\mathrm{d}k'\,\frac{\epsilon_{k'} + \omega_0}{\epsilon_k^2 - (\epsilon_{k'} + \omega_0)^2}\,\frac{gQ_0 + \bar{\beta}_{k'}}{\sqrt{(gQ_0 + \bar{\beta}_{k'})^2 + (\bar{\gamma}_{k'} + t)\sin^2 k'}}, \tag{18}$$

$$\bar{\gamma}_k = -\frac{g^2}{2\pi\omega_0}\int\mathrm{d}k'\,\frac{\epsilon_{k'} + \omega_0}{\epsilon_k^2 - (\epsilon_{k'} + \omega_0)^2}\,\frac{(\bar{\gamma}_{k'} + t)\sin^2 k'}{\sqrt{(gQ_0 + \bar{\beta}_{k'})^2 + (\bar{\gamma}_{k'} + t)\sin^2 k'}}, \tag{19}$$

$$\omega_0^2 Q_0 = \frac{2}{\pi}g\int\mathrm{d}k\,\frac{gQ_0 + \bar{\beta}_k}{\sqrt{(gQ_0 + \bar{\beta}_k)^2 + (\bar{\gamma}_k + t)^2\sin^2 k}}, \tag{20}$$

$$\epsilon_k = 2\sqrt{(gQ_0 + \bar{\beta}_k)^2 + (\bar{\gamma}_k + t)^2\sin^2 k}/(1 - \alpha_k). \tag{21}$$

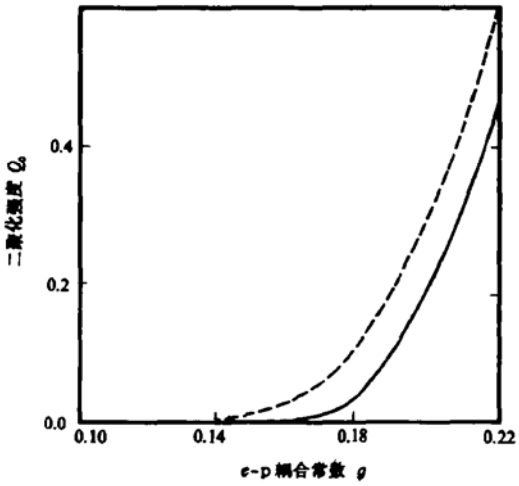

图 1　二聚化强度 Q_0 - e-p 耦合常数 g 曲线　声子频率 $\omega_0 = 0.5$；虚线是绝热近似结果；实线是考虑量子起伏后的结果

注意这些方程中的积分限都是从 $-\pi/2$ 到 $\pi/2$. 令 $t=1$ 作为能量单位，声子能量 $\omega_0 = 0.5$，对五个方程进行数值解，结果如图 1 所示，它描述了晶格量子起伏对 CDW 基态的影响. 虚线代表绝热近似下二聚化强度 Q_0 与 e-p 耦合常数 g 的关系，实线代表考虑量子起伏的结果. 从这些关系曲线可以看出，在强耦合情况下，CDW 只是稍微削弱，但在弱耦合情况下，CDW 严重削弱以至几乎被破坏.

3　讨　论

利用自洽重整化方法，讨论了量子起伏对 CDW 基态的影响. 通过格林函数技术，得到五个方程. 由这五个方程可自洽地解得基态二聚化强度及电子能谱. 结果表明，对有限的声子频率，量子起伏减弱二聚化强度.

从以上结果，我们可以估计在实际 MX 络合物中量子起伏效应究竟有多大. 将哈密顿量(1)式(其中 $t=1$)与 MX 络合物中通用的哈密顿量作比较[19]，

$$H = -t\sum_l(c_{l\sigma}^{\dagger}c_{l+1\sigma} + \mathrm{H.c.}) + \sum_l(\frac{1}{2}M\dot{q}_l^2 + Kq_l^2) + \beta\sum_{l\sigma}(q_l - q_{l-1})n_{l\sigma}, \tag{22}$$

其中 M 是卤素原子 X 的质量，K 是弹性常数，β 是 e-p 耦合常数，得

$$g = \frac{\beta}{\sqrt{Mt^3}}, \quad \omega_0 = \sqrt{\frac{2K}{Mt^2}}.$$

例如对 PtCl，e-p 耦合作用强，根据物理分析及与文章[19]中实验的比较，我们得到参数的范围：$\omega_0 \simeq 0.18$ 和 $g \sim 0.2$—0.3. 因为 e-p 耦合常数大而声子能量相对较小，因此量子起伏对二聚化强度的削弱预计较小. 尽管如此，反比平方根奇性仍会消失，态密度仍会延伸至能隙间[13]，这些现象在 PtCl 实验中都已观察到[2]. 尽管我们的模型与分子晶体

(MC)模型有区别,但将二者作比较也是有益的[14,15].将哈密顿量(1)式改写为

$$H=\frac{1}{2}\sum_l(\dot{Q}_l^2+\omega_0^2Q_l^2)-t\sum_l(c_{l\sigma}^{\dagger}c_{l+1\sigma}+\mathrm{H.c.})$$
$$+g\sum_{l\sigma}Q_l[(n_{l\sigma}-\frac{1}{2})-(n_{l-1\sigma}-\frac{1}{2})]. \tag{23}$$

CDW 态给出 $n_{l\sigma}-\frac{1}{2}=-(n_{l-1\sigma}-\frac{1}{2})$(实际上,只有$\langle n_{l\sigma}-\frac{1}{2}\rangle=-\langle n_{l-1\sigma}-\frac{1}{2}\rangle$),这样

$$H=\frac{1}{2}\sum_l(\dot{Q}_l^2+\omega_0^2Q_l^2)-t\sum_l(c_{l\sigma}^{\dagger}c_{l+1\sigma}+\mathrm{H.c.})+2g\sum_{l\sigma}Q_l(n_{l\sigma}-\frac{1}{2}). \tag{24}$$

与 MC 模型哈密顿量比较,并使用他们在文献[15]中所使用的单位($t=1$, $K=0.25$),哈密顿量(24) 式中的 g 等价于$\frac{1}{2}\lambda$, λ 是 MC 模型中的 e-p 耦合常数,因此图 1 中的 e-p 耦合常数对应 $\lambda\sim0.24$—0.48,而我们的结果与文献[15]中 Monte Carlo 模拟所得图 5(a)($\omega_0=0.41$)相近.当 e-p 耦合弱时,二者都预言,由于零点振动,CDW 强度将严重削弱.

附 录 A

这里给出推导方程(4)和(6)的一些细节.使用变换

$$c_{l\sigma}=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_k e^{ikl}\{e^{\frac{1}{2}\pi l}(c_ka_{1k\sigma}+s_ka_{2k\sigma})+e^{-\frac{1}{2}\pi l}(s_ka_{1k\sigma}-c_ka_{2k\sigma})\}, \tag{A1}$$

其中 $s_k=\sin\theta_k$, $c_k=\cos\theta_k$,得

$$\sum_{l\sigma}(c_{l\sigma}^{\dagger}c_{l+1\sigma}+\mathrm{H.C.})=-2\sum_{k\sigma}\sin k[(c_k^2-s_k^2)(a_{1k\sigma}^{\dagger}a_{1k\sigma}-a_{2k\sigma}^{\dagger}a_{2k\sigma})+2c_ks_k(a_{1k\sigma}^{\dagger}a_{2k\sigma}+a_{2k\sigma}^{\dagger}a_{1k\sigma})], \tag{A2}$$

$$\sum_{l\sigma}(-1)^lc_{l\sigma}^{\dagger}c_{l\sigma}=\sum_k[2s_kc_k(a_{1k\sigma}^{\dagger}a_{1k\sigma}-a_{2k\sigma}^{\dagger}a_{2k\sigma})-(c_k^2-s_k^2)(a_{1k\sigma}^{\dagger}a_{2k\sigma}+a_{2k\sigma}^{\dagger}a_{1k\sigma})], \tag{A3}$$

和

$$\sum_{l\sigma}F_lc_{l\sigma}^{\dagger}c_{l\sigma}=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{kk'\sigma}\{[(c_ka_{1k\sigma}^{\dagger}+s_ka_{2k\sigma}^{\dagger})(c_{k'}a_{1k'\sigma}+s_{k'}a_{2k'\sigma})+(s_ka_{1k\sigma}^{\dagger}-c_ka_{2k\sigma}^{\dagger})(s_{k'}a_{1k'\sigma}-c_{k'}a_{2k'\sigma})]F(k-k')$$
$$+[(c_ka_{1k\sigma}^{\dagger}+s_ka_{2k\sigma}^{\dagger})(s_{k'}a_{1k'\sigma}-c_{k'}a_{2k'\sigma})+(s_ka_{1k\sigma}^{\dagger}-c_ka_{2k\sigma}^{\dagger})(c_{k'}a_{1k'\sigma}+s_{k'}a_{2k'\sigma})]F(k-k'-\pi)\}, \tag{A4}$$

其中 $F_l=\varphi_l-\varphi_{l-1}$, $F(k)=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_lF_le^{-ikl}=\varphi(k)(1-e^{-ik})$.

从以上方程,我们得到方程(6)的 $S_i(k,k')(i=1,2)$为

$$S_1(k,k')=\begin{pmatrix}c_kc_{k'}+s_ks_{k'} & c_ks_{k'}-s_kc_{k'}\\ s_kc_{k'}-c_ks_{k'} & s_ks_{k'}+c_kc_{k'}\end{pmatrix},$$

和

$$S_2(k,k')=\begin{pmatrix}c_ks_{k'}+s_kc_{k'} & s_ks_{k'}-c_kc_{k'}\\ s_ks_{k'}-c_kc_{k'} & -s_kc_{k'}-c_ks_{k'}\end{pmatrix}.$$

附 录 B

这里给出方程(8)中 α_k, β_k 和 γ_k 的表示式.

$$\alpha_k=\frac{g^2}{\pi\omega_0}\int\frac{dk'}{\varepsilon_k^2-(\varepsilon_{k'}+\omega_0)^2}, \tag{A5}$$

$$\beta_k = \frac{g^2}{\pi\omega_0}\int dk' \frac{(\varepsilon_{k'} + \omega_0)\sin\varphi_{k'}}{\varepsilon_k^2 - (\varepsilon_{k'} + \omega_0)^2}, \tag{A6}$$

$$\gamma_k = -\frac{g^2}{\pi\omega_0}\int dk' \frac{(\varepsilon_{k'} + \omega_0)\cos\varphi_{k'}\cos(k' - k)}{\varepsilon_k^2 - (\varepsilon_{k'} + \omega_0)^2}. \tag{A7}$$

积分限都是从 $-\pi/2$ 到 $\pi/2$.

[1] R. H. McKenzie and J. W. Wilkins, *Phys. Pev. Lett.*, **69**(1992), 1085.
[2] F. H. Long, S. P. Love, B. I. Swanson and R. H. McKenzie, *Phys. Rev. Lett.*, **71**(1993), 762.
[3] B. R. Weinberger *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **53**(1984), 86.
[4] Z. Vardeny *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **54**(1985), 75.
[5] H. Kuzmany, *Pure Appl. Chem.*, **57**(1985), 235.
[6] W. P. Su, J. R. Schrieffer and A. J. Heeger. *Phys, Rev. Lett.*, **42**(1979), 1698; *Phys. Rev.* **B22**(1980), 2099.
[7] E. Fradkin and J. E. Hirsh, *Phys. Rev.*, **B27**(1983), 1680.
[8] G. C. Psaltakis and N. Papanicolaou, *Solid State Commun.*, **66**(1988), 87.
[9] W. P. Su, *Solid State Commun.*, **42**(1982), 497.
[10] Z. B. Su, Y. X. Wang and L. Yu, *Commun. Theor. Phys.*, **6**(1986), 313.
[11] D. Schmeltzer. R. Zeyher and W. Hanke, *Phys. Rev.*, **B33**(1986), 5141.
[12] K. Iwano and K. Nasu, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **61**(1992), 1380.
[13] H. Zheng, *Phys. Rev.*, **B50**(1994), 6717.
[14] H. Zheng, D. Feinberg and M. Avignon, *Phys. Rev.*, **B39**(1989), 9405; S. M. Weber-Milbrodt, J. T. Gammel, A. R. Bishop and E. Y. Loh, Jr., *Phys. Rev.*, **B45**(1992), 6435.
[15] J. E. Hirsch and E. Fradkin, *Phys. Rev.*, **B27**(1983), 4302.
[16] H. Chu. *Solid State Commun.*, **84**(1992), 345.
[17] M. Nakahara and K. Maki, *Phys. Rev.*, **B25**(1982), 7789.
[18] J. T. Gammel, A. Saxena, I. Batisti ć, A. R. Bishop and S. R. Phillpot, *Phys. Rev.*, **B45**(1992), 6408 and references therein.
[19] D. Baeriswyl and A. R. Bishop, *Physica Scripta*, **T19**(1987)239; *J. Phys. C*, **21**(1988)339; S. D. Conradson, M. A. Stroud, M. H. Zietlow, B. I. Swanson, D. Baeriswyl and A. R. Bishop, *Solid State Commun.*, **65**(1988), 723.

ZERO-POINT LATTICE VIBRATION IN *MX* COMPLEX

XU XUE-TONG　YU ZHI-GANG　SUN XIN

(*National Laboratory of Infrared Physics. Academia Sinica, Shanghai* 200083;
Department of Physics T. D. Lee Physics Laboratory, Fudan University, Shanghai 200433)

(Received 11 November 1994)

ABSTRACT

The effect of zero-point lattice vibration on the CDW of *MX* Complex is investigated in a wide range of electron-phonon coupling by using a self-consistent renormalization method. In contrast to the polyacetylene, where the bond order wave exists well in arbitrary coupling, the effect of the quantum fluctuation on CDW of *MX* solid distinctly depends on the coupling. When the coupling is strong, the reduction of CDW is small; But, if the coupling is weak, the CDW is seriously suppressed and even nearly destroyed. This contrast is related to the fact that for weak coupling, the frequencies of both the acoustic and optical branches are small in polyacetylene, but these frequencies are not well different from the bare value $\omega_0$in *MX* solid.

PACC: 7138; 7145L; 7215N