

Interpretación de la validez de las aproximaciones adiabática y antiadiabática en un sistema de tres sitios con correlaciones fuertes

S. Koval y C. J. Gazza

*Instituto de Física Rosario, Universidad Nacional de Rosario,
Bvd. 27 de Febrero 210 Bis, 2000 Rosario, República Argentina*

Analizamos la validez de las aproximaciones adiabática y antiadiabática en un modelo con interacciones electrón-electrón y electrón-fonón para un sistema de tres sitios. Este modelo describe el movimiento de oxígenos apicales en $YBa_2Cu_3O_7$. Se muestra que la aproximación adiabática deja de ser válida a un valor crítico de la constante de acoplamiento infrarrojo donde la diferencia de energía entre el primer estado excitado y el estado fundamental electrónico se hace igual a la altura de la barrera del potencial doble pozo. Para este valor grande del acoplamiento, el movimiento de huecos e iones está altamente correlacionado. Se concluye que en este modelo, la aproximación adiabática es válida aún en una región de parámetros donde la escala de la energía electrónica no es mucho más grande que la escala de la energía vibracional. Esta aproximación describe efectos polarónicos que aparecen en el espectro de absorción infrarrojo obtenido en un cálculo exacto del mismo sistema. Investigamos también el rango de validez de la aproximación antiadiabática. La ventana en la región de parámetros donde las dos aproximaciones no son válidas, se achica al disminuir la repulsión en el sitio U hasta cerrarse con $U = 0$.

We analyze the validity ranges of the adiabatic and antiadiabatic approximations for a model with electron-electron and electron-phonon interactions for a three-site cluster. This model describes the motion of apical oxygens in $YBa_2Cu_3O_7$. We show that the adiabatic approximation holds up to a critical infrared coupling where the gap between the ground and first excited electronic states becomes nearly equal to the double-well potential barrier. For this high coupling value, the motion of holes and ions is already highly correlated. We arrive at the nontrivial conclusion that in this model the adiabatic approximation is valid even in a parameter region where the electronic energy scale is not much larger than the phononic one. This approximation is able to describe polaronic effects which have been shown to appear in the infrared absorption spectrum in previous exact numerical calculations. We also investigate the range of validity of the antiadiabatic approximation. We find that the window where none of the above mentioned approximations are valid shrinks with decreasing on-site repulsion U until it closes at $U = 0$ in agreement with other works in the literature.

71.38.+i, 63.20.Kr

Resultados experimentales recientes, EXAFS^{1,2} y Raman³ en $YBa_2Cu_3O_7$ muestran una estructura doble-pozo y una alta anarmonicidad en el movimiento del oxígeno apical en el eje c , aunque esta interpretación ha sido ampliamente discutida^{4,5}. En un trabajo reciente^{6,7}, hemos demostrado la validez de la aproximación adiabática, en un sistema con interacción electrón-fonón (EF) fuerte, que ha sido estudiado también exactamente⁸. El propósito de este trabajo es analizar el criterio e interpretar la validez de la aproximación adiabática y antiadiabática en un sistema de tres sitios. Consideremos el modelo de Holstein-Hubbard de⁸ para dos oxígenos apicales $O(4)$ y un cobre de la cadena $Cu(1)$ en $YBa_2Cu_3O_7$,

$$H = H_{el} + H_{ph} + H_{el-ph}, \quad (1)$$

donde

$$H_{el} = \sum_{\sigma} \sum_{i=1}^3 \epsilon_i n_{i\sigma} + U \sum_{i=1}^3 n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + t \sum_{\sigma} \left[(c_{1\sigma}^{\dagger} c_{2\sigma} + c_{3\sigma}^{\dagger} c_{2\sigma}) + h.c. \right] \quad (2)$$

$$H_{ph} = \hbar\omega_{ir}^0 b_{ir}^{\dagger} b_{ir} + \hbar\omega_R^0 b_R^{\dagger} b_R \quad (3)$$

$$H_{el-ph} = -\lambda_R (b_R^{\dagger} + b_R) \sum_{\sigma} 2(n_{1\sigma} - 2n_{2\sigma} + n_{3\sigma}) - \lambda_{ir} (b_{ir}^{\dagger} + b_{ir}) \sum_{\sigma} (n_{3\sigma} - n_{1\sigma}) \quad (4)$$

donde, $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma}$ denota el operador número de agujeros de spin σ en el sitio i ; $i = 1, 3$ indica los sitios $O(4)$ de abajo y arriba, e $i = 2$ el sitio $Cu(1)$, con energías ϵ_i ($\epsilon_1 = \epsilon_3 \neq \epsilon_2$), "hopping" t , y repulsión en el sitio U . Las cargas iónicas son -2 para oxígenos y $+1$ para el cobre, y se agregan dos agujeros al sistema. b_R^{\dagger} y b_{ir}^{\dagger} indican los operadores de creación fonónicos de los modos normales Raman (R) e infrarrojo (ir) y ω_R^0 y ω_{ir}^0 las respectivas frecuencias desnudas. Los operadores están relacionados con las coordenadas R e ir así:

$$u_{\alpha} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m_O\omega_{\alpha}^0}} (b_{\alpha}^{\dagger} + b_{\alpha}) \quad (5)$$

donde $\alpha = ir, R$.

Este modelo fue diagonalizado exactamente por Mustre de Leon *et al.*⁸ usando Lanczos con una base de 40 fonones R, 40 fonones ir y 9 estados electrónicos de los dos huecos en el sistema de tres sitios (14400 estados). Se usaron los siguientes parámetros en Ec.(1): $\epsilon_{1,3} = -\epsilon_2 = 0.5$ eV, $t=0.5$ eV, $U = 7.0$ eV, $\omega_R^0 = 500\text{cm}^{-1}$, y $\omega_{ir}^0 = 600\text{cm}^{-1}$. Estos autores encontraron que la función de onda tiene una estructura de doble pico en la coordenada ir a partir de $\lambda_{ir} \simeq 0.12$ eV. En la coordenada R solo se encontró un solo pico, corrido de la posición de equilibrio $u_R = 0$. Se obtuvieron estructuras peculiares en el espectro de absorción infrarrojo que se atribuyeron a efectos no adiabáticos. En este trabajo reinvestigamos este modelo con el propósito ya mencionado, comparando con los resultados exactos.

En la aproximación adiabática las coordenadas fonónicas son tratadas clásicamente, y el estado fundamental electrónico se calcula exactamente en función de estas cantidades. La correspondiente energía del estado fundamental $E_0(u_{ir}, u_R)$ es usada luego como potencial para resolver la ecuación de Schrödinger para la dinámica iónica. Para resolver ésta, usamos una base de 15 polinomios de Hermite por cada coordenada. En la aproximación antiadiabática, para configuración electrónica arbitraria, primero se determina las coordenadas fonónicas de equilibrio y la energía total del sistema. Se construye una matriz de 9×9 y se diagonaliza, produciendo finalmente los distintos estados del sistema.

El criterio usado en la literatura para la validez de la aproximación adiabática es que las energías de excitación electrónicas son mucho más altas que las fonónicas⁹⁻¹¹. Veremos que aún cuando este criterio no es satisfecho en este cálculo, el tratamiento adiabático reproduce correctamente las energías y funciones de onda de los estados del sistema. La validez de las funciones de onda, se verifican a través de la reproducción del espectro de absorción infrarroja. Por otro lado, la aproximación antiadiabática es esperable que funcione bien cuando las energías de excitación electrónicas sean muy pequeñas respecto a las fonónicas¹⁰. Esto se satisface para valores del acoplamiento EF grandes.

El resultado del cálculo adiabático de $E_0(u_{ir}, u_R)$ como función de λ_{ir} muestra una estructura doble-pozo en la coordenada infrarroja para $\lambda_{ir} \geq 0.11$ eV, mientras que en términos de u_R presenta un solo mínimo cuya posición depende de λ_R (en este trabajo consideraremos $\lambda_R = \lambda_{ir}$ para $\lambda_{ir} \leq 0.10$ eV, y $\lambda_R = 0.10$ eV para $\lambda_{ir} \geq 0.10$ eV, de la misma forma que en⁸). Esto concuerda bien con los cálculos exactos⁸, donde el valor crítico es $\lambda_{ir} = 0.12$. También se obtiene buen acuerdo con el experimento y con los cálculos exactos, para la separación entre los picos, aproximadamente 0.125 \AA para $\lambda_{ir} \simeq 0.12$ eV.

Una estructura doble-pozo en la coordenada ir, se obtuvo también en un modelo para las cadenas de $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ donde la interacción EF se introduce como una modulación de la integral de "hopping"¹². Queremos puntualizar que un estudio sistemático de

la validez de la aproximación adiabática es importante ya que permitiría el análisis de sistemas más grandes.

Resolvemos la ecuación de Schrödinger para el movimiento iónico usando $E_0(u_{ir}, u_R)$ como energía potencial. Las primeras transiciones infrarrojas permitidas son mostradas en Fig.1, donde se comparan con los valores exactos.

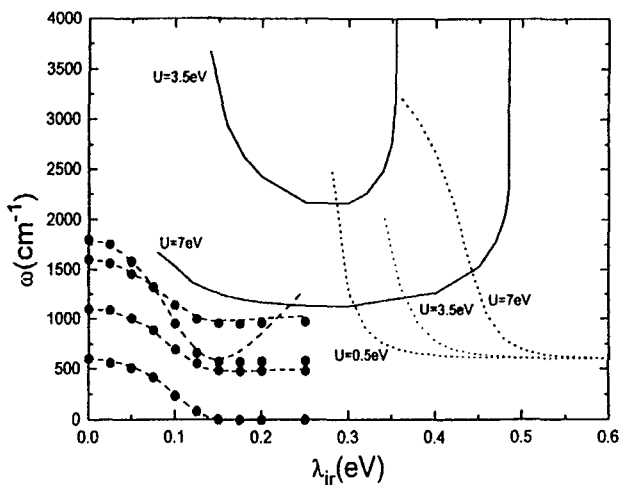


FIG. 1. Líneas a trazos: energías de las primeras cuatro transiciones dipolares permitidas al estado fundamental del sistema para $U = 7$ eV en la aproximación adiabática, y resultados exactos de⁸ (círculos llenos). Líneas punteadas: energías de las transiciones dipolares en la aproximación antiadiabática para diferentes valores de U . También se muestran en líneas llenas la diferencia de energía electrónica entre el estado fundamental y el primer excitado, para diferentes valores de U .

Vemos un acuerdo notable hasta $\lambda_{ir} \sim 0.16$ eV. Notese que los primeros estados excitados electrónicos para $U = 7$ eV y 3.5 eV, no están muy por encima de los niveles vibracionales más altos considerados. Como ya lo mencionamos, a pesar de que el criterio usual para la validez de la aproximación adiabática no se cumple, ésta sigue siendo válida. Para valores de $\lambda_{ir} > 0.16$ eV, la aproximación adiabática falla al menos en reproducir la energía de una banda, que corresponde a tres fonones infrarrojos en $\lambda_{ir} = 0$. Esta banda debería tender a la frecuencia infrarroja desnuda de 600 cm^{-1} , como se puede ver para los resultados exactos, pero a partir de $\lambda_{ir} \sim 0.16$ eV, comienza a crecer sistemáticamente en energía. Las otras bandas de baja energía son bien reproducidas aún a acoplamientos muy fuertes ($\lambda_{ir} \sim 0.25$ eV) donde alcanzan valores constantes. Notar que la energía de la banda inferior (que es la frecuencia de tuneo cuando el doble-pozo aparece), tiende a cero a medida que la altura de la barrera crece para acoplamientos grandes. Los límites de las otras bandas son las energías de un fonón R y dos fonones R.

Para entender este comportamiento, y el régimen de validez de la aproximación adiabática, mostramos en Fig.2 las energías electrónicas del estado fundamental y primer excitado para diferentes valores de λ_{ir} . La primer columna muestra las energías en función de

u_{ir} , donde u_R fue fijado en el mínimo de la energía del estado fundamental. De forma inversa, en la segunda columna vemos las mismas energías como función de u_R , fijando u_{ir} en uno de los mínimos del estado fundamental degenerado. La aproximación adiabática trabaja bien siempre que los iones oscilen alrededor del mínimo de la energía del estado fundamental y no se produzca ninguna transición al primer estado excitado electrónico. Para $\lambda_{ir} = 0.1$ eV, observamos en Fig.2a y b una brecha de energía aproximadamente constante entre los dos niveles electrónicos más bajos. Por lo tanto, el movimiento iónico a lo largo de las coordenadas R e ir, raramente produciría una transición electrónica al nivel más alto ya que esto implica un mayor costo de energía que la ganancia debida a las oscilaciones iónicas alrededor del mínimo del estado fundamental electrónico. Notemos que este argumento es válido a pesar que la brecha de energía es solo 2.5 veces más grande que la frecuencia infrarroja desnuda.

Por otro lado, vemos en Fig.2c para $\lambda_{ir} = 0.16$ eV que para saltar a través de la barrera entre los mínimos del doble-pozo del estado fundamental, los iones deben invertir una energía del orden de la brecha entre los dos niveles electrónicos más bajos. Consecuentemente, existe una gran probabilidad de transición electrónica, hecho que anula la validez de la aproximación adiabática. Más aún, para $\lambda_{ir} = 0.25$ eV podemos ver en Fig.2e, que la brecha entre los niveles electrónicos más bajos es mucho más chica que la barrera del doble-pozo. En consecuencia, la probabilidad para una transición electrónica se hace más alta en la medida que λ_{ir} crece más allá del valor crítico $\lambda_{ir} = 0.16$ eV. Esto produce la desviación respecto de los resultados exactos, de la banda con carácter infrarrojo para $\lambda_{ir} > 0.16$ eV (ver Fig.1). De acuerdo con los resultados exactos, esta banda se acerca a la energía de un fonón ir para acoplamientos grandes.

En el modo R, los iones oscilan alrededor de un solo mínimo, y la brecha entre los niveles electrónicos es considerablemente mayor que las energías de los movimientos oscilatorios, aún para valores grandes de λ_{ir} (ver Figs.2d y f). Notemos que la brecha en Fig.2f es del orden de 0.14 eV, solo un 30 % más pequeña que el valor correspondiente en Fig.2b. Por ende, la aproximación adiabática es válida para las bandas con carácter R, como vemos en Fig.1. (ver las bandas a 500 cm^{-1} y 1000 cm^{-1} desde $\lambda_{ir} = 0.16$ eV hasta $\lambda_{ir} = 0.25$ eV).

Para chequear la aproximación antiadiabática, realizamos cálculos a partir de valores grandes de λ_{ir} . Obtenemos un estado fundamental prácticamente degenerado con los huecos ubicados casi totalmente en uno de los dos oxígenos. Esto concuerda con los resultados exactos de ⁸: a grandes valores de λ_{ir} ocurre un congelamiento de los agujeros en los sitios de oxígeno, que resulta en oscilaciones armónicas con la frecuencia infrarroja desnuda, alrededor de las nuevas posiciones de equilibrio de los iones. A medida que λ_{ir} decrece, los dos niveles casi degenerados empiezan a separarse. Para $U = 7$ eV, esta separación es $\sim 10\%$

de la energía del modo infrarrojo para $\lambda_{ir} \sim 0.48$ eV. Este último valor es justamente el acoplamiento crítico donde hay un cambio abrupto en el estado fundamental electrónico. (notar que en Fig.1, la región donde los niveles comienzan a separarse para $U = 7$ eV, prácticamente coincide con la región donde la pendiente en la energía electrónica tiende a infinito).

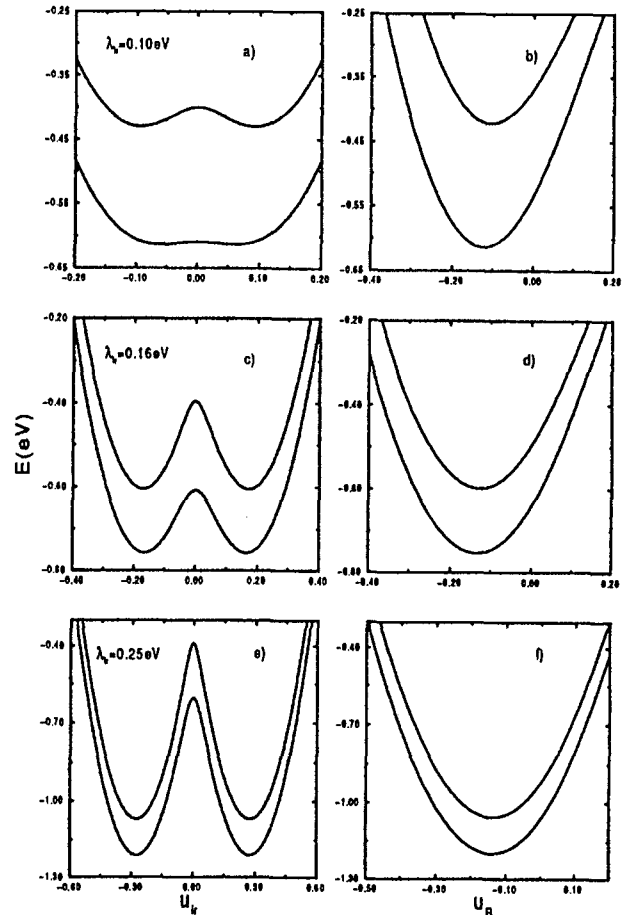


FIG. 2. Energías de los dos niveles electrónicos más bajos en función de las coordenadas ir (primera columna) y R (segunda columna). a) y b): $\lambda_{ir} = 0.10$ eV. c) y d): $\lambda_{ir} = 0.16$ eV. e) y f): $\lambda_{ir} = 0.25$ eV. Las unidades de las coordenadas ir y R son Å.

Para valores más pequeños de este acoplamiento, los huecos no están más congelados en los sitios de oxígeno y tienen una probabilidad no nula de saltar al ión de cobre. Por lo tanto, consideramos este acoplamiento crítico como aproximadamente el límite de validez de esta aproximación. Para valores más pequeños de U , la aproximación antiadiabática continúa siendo válida para menores valores de λ_{ir} , como se ve en Fig.1. Debido a que en la región adiabática, las energías de los primeros estados electrónicos crecen al decrecer U , esta aproximación extiende también su rango de validez. Esta conclusión se ve reforzada por el hecho de que para valores más chicos de U , el acoplamiento infrarrojo para el cual el doble-pozo aparece, es más grande (para $U = 3.5$ eV, el doble-pozo aparece a $\lambda_{ir} = 0.16$ eV). Por lo tanto, la ventana

donde ninguna de las dos aproximaciones son válidas, se achica al disminuir la repulsión en el sitio U hasta cerrarse con $U = 0$ ¹⁰.

Un testeo más exigente todavía para la aproximación adiabática, es reproducir las características peculiares del espectro de absorción infrarrojo hallado en ⁸. Para esto, evaluamos la parte imaginaria de la función dieléctrica:

$$\epsilon(\omega) = \sum_j \frac{S_j \omega_j^2}{\omega_j^2 - \omega^2 - i\omega\gamma}, \quad (6)$$

donde los pesos espectrales S_j y el operador momento dipolar p son:

$$S_j = |\langle j|p|0 \rangle|^2 \quad (7)$$

y

$$p = - \left[8 \left(1 + \frac{2m_O}{m_{Cu}} \right) \right]^{1/2} u_{ir} + \sum_{\sigma} \left(R_{\sigma} - \frac{u_R}{\sqrt{2}} \right) (n_{3\sigma} - n_{1\sigma}) + \sum_{\sigma} \left(1 + \frac{2m_O}{m_{Cu}} \right)^{1/2} \frac{u_{ir}}{\sqrt{2}} (n_{3\sigma} + n_{1\sigma}). \quad (8)$$

En esta ecuación $R_0 = 1.87 \text{ \AA}$ es la distancia de equilibrio Cu-O. Tomamos para el ancho de línea el valor $\gamma = 0.34 \text{ cm}^{-1}$. Para evaluar S_j , usamos nuestras funciones de onda aproximadas $\Psi_j(u_{ir}, u_R)$, con j restringido a las primeras cuatro transiciones dipolares permitidas, lo que es suficiente para comparar con los resultados exactos. En la integración sobre las variables u_{ir}, u_R es importante tener en cuenta apropiadamente la dependencia de $n_{3\sigma}$ y $n_{1\sigma}$ con éstas. Esto requiere calcular el estado fundamental electrónico en cada paso de integración. El espectro obtenido se muestra en Fig.3a para $\lambda_{ir} = 0.13 \text{ eV}$, junto con los resultados exactos de ⁸. La característica más peculiar del espectro es el pico B que Mustre de Leon *et al.* asignaron enteramente a efectos no adiabáticos. En nuestro cálculo aparece debido a la dependencia de la función de onda electrónica en las coordenadas fonónicas, y a la no-separabilidad del potencial efectivo $E_0(u_{ir}, u_R)$. Usando un potencial doble-pozo rígido ^{1,2}, el pico B no aparece ⁸. El pico A está centrado a la frecuencia de tuneleo entre los dos mínimos del potencial doble-pozo en la coordenada ir. Tenemos $\omega_A = 53 \text{ cm}^{-1}$, comparable al valor exacto 52 cm^{-1} . Cabe mencionar que para $\lambda_{ir} = 0.15 \text{ eV}$ cerca del acoplamiento crítico donde la aproximación adiabática deja de funcionar, tenemos $\omega_A = 9.5 \text{ cm}^{-1}$, que todavía concuerda con el valor exacto 8 cm^{-1} ⁸. En nuestro caso la intensidad del pico A es ~ 6 veces más grande que la del pico C. En el cálculo exacto esta relación es 10. De todas formas, con un pequeño cambio en λ_{ir} (de 0.130 a 0.127 eV) obtenemos la misma relación entre picos, con muy pequeños cambios en el resto del espectro (corrimientos menores

al 3% en las frecuencias en que B y C están centradas, y un 7% de incremento en la intensidad del pico B). Por otro lado, nuestros resultados para $\lambda_{ir} \simeq 0.130 \text{ eV}$ tienen un mejor acuerdo con los resultados exactos para $\lambda_{ir} \simeq 0.133 \text{ eV}$ ¹³ (ver Fig.3b). Luego, para un λ_{ir} ligeramente diferente, el espectro exacto es reproducido cualitativamente y aún hasta cierto grado, cuantitativamente. Notemos que un menor valor de λ_{ir} conduce a un aumento de la intensidad de los picos A y B, lo que refuerza la idea que los efectos no adiabáticos no son relevantes para la aparición del pico B.

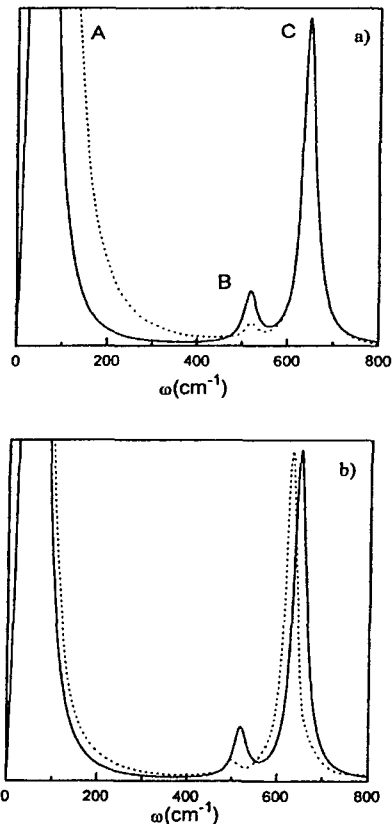


FIG. 3. Espectro de absorción infrarrojo en unidades arbitrarias para $U_{\sigma} = 7 \text{ eV}$, $\lambda_R = 0.1 \text{ eV}$, y $\lambda_{ir} = 0.13 \text{ eV}$. Línea llena: aproximación adiabática. Líneas a trazos: resultados exactos para a) $\lambda_{ir} = 0.13 \text{ eV}$ de ⁸, y b) $\lambda_{ir} = 0.133 \text{ eV}$ de ¹³.

En Fig.4, mostramos como la intensidad del pico B decrece en la aproximación adiabática tendiendo a cero a medida que λ_{ir} se incrementa. Este comportamiento muestra al menos cualitativamente que la función de onda asociada al pico B, tiene correctamente a la región donde tiene carácter Raman y peso espectral nulo. Lo mismo ocurre con el modo cuya frecuencia tiende a $2\omega_R^0$, pero su intensidad es menor que la del pico B. También observamos la tendencia correcta de las frecuencias de los centros de los picos C y B, que se aproximan a ω_{ir}^0 y ω_R^0 respectivamente, a medida que λ_{ir} crece hasta el valor $\lambda_{ir} \sim 0.16 \text{ eV}$ (ver también Fig.1). La intensidad del pico A a

$\lambda_{ir} = 0.13$ eV es 10 veces mayor que la correspondiente a $\lambda_{ir} = 0.14$ eV, mostrando también la tendencia cualitativa correcta a medida que λ_{ir} se incrementa. Notar que solo se pueden inferir tendencias para esos valores de acoplamiento, debido al hecho que a $\lambda_{ir} = 0.16$ eV la aproximación adiabática deja de valer. De todas formas, estas tendencias concuerdan con los resultados exactos, donde para valores suficientemente grandes de λ_{ir} , el espectro de absorción converge a un solo pico a ω_{ir}^0 .

En conclusión, la aproximación adiabática es válida en un sistema donde la escala de energía electrónica no es mucho más grande que la fonónica. Esta aproximación empieza a fallar para un acoplamiento infrarrojo donde la brecha entre el estado fundamental electrónico y primer excitado se hace más chica que la barrera del potencial doble-pozo. En el espectro de absorción infrarrojo se ve afectada solo una banda de carácter ir que debería tender a ω_{ir}^0 para λ_{ir} grandes. Por otro lado, la aproximación reproduce las bandas que tienden a ω_R^0 y $2\omega_R^0$ para λ_{ir} grandes. Esto se explica con el hecho de que la brecha entre los primeros estados electrónicos es más grande que las variaciones de energía asociadas a los modos R. También determinamos la validez de la aproximación antiadiabática para valores grandes del acoplamiento donde los huecos están prácticamente congelados en los sitios de oxígeno. La ventana donde ninguna de las aproximaciones es válida, se cierra con U . La validez de la función de onda total se verifica mediante el espectro de absorción infrarrojo, donde se reproduce un pequeño pico que aparece en los cálculos exactos. Este es debido a la mezcla de los modos R e ir a través de las correlaciones EF. Todas las conclusiones mencionadas son válidas cualitativamente para distintos valores de los parámetros fijos de este modelo (ϵ , t y ω^0). Cabe mencionar que la reflectividad infrarroja del La_2CuO_4 muestra una asimetría hacia el lado de menor frecuencia para el pico del modo "stretching"¹⁴. En un trabajo previo, se concluyó que dicho comportamiento podría ser debido a una excitación polarónica¹⁵. Experimentos de potadores fotoinducidos¹⁶ muestran un "bleaching" para el modo "stretching", que concuerda con esta interpretación. Mediciones de reflectividad infrarroja en muestras dopadas químicamente, detectan también con oxidación creciente, la mencionada asimetría¹⁷. Como perspectiva, sería interesante analizar en el futuro con un modelo EF y dentro de la aproximación adiabática, la posibilidad de dar cuenta de este comportamiento en las bandas de reflectividad. Notar que este comportamiento en el espectro infrarrojo sería el análogo del pequeño pico B encontrado, pero considerando la posibilidad de formación polarónica a través de la mezcla del modo "stretching" y otros modos fonónicos con portadores, debido a una interacción EF fuerte.

Finalmente, hemos mostrado que el uso apropiado de las aproximaciones adiabática y antiadiabática reproducen los resultados exactos en un modelo con correlaciones EF y electrónicas fuertes, para gran parte del espacio de parámetros.

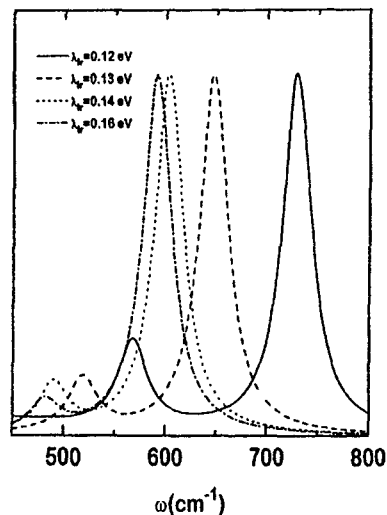


FIG. 4. Espectro de absorción infrarrojo en unidades arbitrarias para $U = 7$ eV, mostrando solo los picos C y B en la aproximación adiabática para diferentes valores de λ_{ir} .

- ¹ J. Mustre de Leon, S.D. Conradson, I. Batistić, and A.R. Bishop. *Phys. Rev. Lett.*, 65:1675, 1990.
- ² J. Mustre de Leon, S.D. Conradson, I. Batistić, and A.R. Bishop. *Phys. Rev. B*, 44:2422, 1991.
- ³ G. Ruani, C. Taliani, M. Muccini, K. Conder, E. Kaldis, H. Keller, D. Zech, and K.A. Müller. *Physica C*, 226:101, 1994.
- ⁴ C. Thomsen and M. Cardona. *Phys. Rev. B*, 47:12320, 1993.
- ⁵ J. Mustre de Leon, I. Batistić, A.R. Bishop, S.D. Conradson, and I. Raistrick. *Phys. Rev. B*, 47:12322, 1993.
- ⁶ S. Koval, C.J. Gazza, H.A. Ceccatto, and R.L. Migoni. *Phys. Rev. Lett.*, 75:583, 1995.
- ⁷ J. Mustre de Leon, I. Batistić, A.R. Bishop, S.D. Conradson, and S.A. Trugman. *Phys. Rev. Lett.*, 75:584, 1995.
- ⁸ J. Mustre de Leon, I. Batistić, A.R. Bishop, S.D. Conradson, and S.A. Trugman. *Phys. Rev. Lett.*, 68:3236, 1992.
- ⁹ J. Zhong and H.B. Schüttler. *Phys. Rev. Lett.*, 69:1600, 1992.
- ¹⁰ A.S. Alexandrov, V.V. Kabanov, and D.K. Ray. *Phys. Rev. B*, 49:9915, 1994.
- ¹¹ M.I. Salkola, A.R. Bishop, S.A. Trugman, and J. Mustre de Leon. *Phys. Rev. B*, 51:8878, 1995.
- ¹² S. Koval and A. Greco. *Solid St. Comm.*, 90:17, 1994.
- ¹³ J. Mustre de Leon, I. Batistić, A.R. Bishop, S.D. Conradson, and S.A. Trugman. *unpublished*.
- ¹⁴ S. Tajima, T. Ido, S. Ishibashi, T. Itoh, H. Eisaki, Y. Mizuo, T. Arima, H. Takagi, and S. Uchida. *Phys. Rev. B*, 43:10496, 1991.
- ¹⁵ S. Koval and R. Migoni. *Phys. Rev. B*, 51:6634, 1995.
- ¹⁶ D. Mihailovic, C.M. Foster, K.F. Voss, T. Mertelj, I. Poberaj, and N. Herron. *Phys. Rev. B*, 44:237, 1991.
- ¹⁷ G.A. Thomas, D.H. Rapkine, S-W. Cheong, and L.F. Schneemeyer. *Phys. Rev. B*, 47:11369, 1993.