



TDK dolgozat

Wigner-kristály elméleti vizsgálata félvezető szén nanocsövekben

Sárkány Lőrinc

TÉMAVEZETŐ: DR. SZIRMAI EDINA ÉS PROF. ZARÁND GERGELY
BME FIZIKAI INTÉZET
ELMÉLETI FIZIKA TANSZÉK

A dolgozat bemutatását a TÁMOP - 4.2.2.B-10/1-2010-0009 "Új tehetséggondozó
programok és kutatások a Műegyetem tudományos műhelyeiben" című program
támogatta.

2012. október 29.

Budapest

Tartalomjegyzék

1. Bevezetés és célkitűzések	2
2. Alapok	3
2.1. Szén nanocsövek szerkezete, az izospin	3
2.2. A Wigner-kristály	6
2.3. A nanocső hullámfüggvényei: $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ perturbációs számítás	7
2.4. Hullámcsomagok	10
3. A modell	11
3.1. Hartree-közelítés	11
3.2. A kicserélődési kölcsönhatás	14
3.3. A kicserélődés szemiklasszikus számítása	22
4. Összefoglalás, kitekintés	24
5. Köszönetnyilvánítás	25
A. Függelék: u_{2q} kiszámítása	25

1. Bevezetés és célkitűzések

Két, önmagában is nagy érdeklődéssel kutatatott területhez is be lehet sorolni a témát, melyről e dolgozat szól: szén nanocsövek és Wigner-kristályok.

A szén nanocsövek erősen kölcsönható egydimenziós elektrongázként számos olyan jelenséget mutatnak, melyek nincsenek jelen egy két- vagy háromdimenziós gázban. Ilyen például a spin-töltés szeparáció, vagy az alacsony energiás egyrészecske-gerjesztések hiánya [1]. Elektronszerkezetük alapvetően függ a geometriájuktól: lehetnek fémesek és félvezetők is. Alacsony hőmérsékleten a félvezető nanocsövek alapállapotú elektronjai egy jól definiált hullámszámmal keringenek a tengely körül egyik, vagy másik irányba, így orbitális mágneses momentummal is rendelkeznek a spinjükön túl [2]. Ez az orbitális momentum egy újfajta „spin” szabadsági fokot jelent, izospinnek nevezzük.

A Wigner-kristály egy régen megjósolt jelenség: kettőnél magasabb dimenzióban, alacsony sűrűségeknél egy kvantum fázisalakulás megy végbe az elektrongázban [3]. Az elektronok közt fellépő Coulomb-taszítás periodikus rácsba lokalizálja az elektronokat. Egy dimenzióban nincs ilyen fázisátalakulás, de híg határesetben megfigyelhető egy Wigner-kristály jellegű rendeződés. Ennek a kísérleti kimutatása nagyon sokáig váratott magára, sokáig egyszerűen nem tudtak elegendően tiszta mintát előállítani. Végül 2008-ban sikerült a kísérlet, pont szén nanocsőben mutatták ki először a lyukakból álló Wigner-kristályt [4, 5]. Helyesebb lenne Wigner-molekulaként hivatkozni rá, mivel a rácshelyek száma nem haladta meg a százat. Változtatva a mágneses teret és a „molekula” méretét, további fázisátalakulásokat figyeltek meg, különféle spin- és izospin polarizált állapotok jelentek meg. A jelenséget leíró numerikus szimulációk is találhatók az irodalomban [6].

A dolgozat a szén nanocsőben kialakult Wigner-kristály modellezésével foglalkozik. Az a célunk, hogy feltérképezzük az elektronok kicserélődési kölcsönhatásának szerkezetét, annak spin-és izospintól való függését, mely nagyban hozzájárulna a jelenségkör megértéséhez. A nanocső atomi struktúrájától indulunk, végül pedig nagyon meglepő eredményre jutunk: egy majdnem tökéletes $SU(4)$ szimmetriával bíró egydimenziós modellel sikerült leírni a kristályt, melynek a szimmetriája sokkal magasabb, mint az eleinte várt $SU(2) \times \mathbb{Z}_2$ modellé. Hasonló modellt sokan tanulmányoztak már, teljesen más indíttatásból, például átmeneti- és ritkaföldfémekből álló vegyületek leírására használták [12].

A dolgozat két nagyobb részből áll. Az elsőben áttekintünk néhány alapvető fogalmat és számolást, melyekre szükségünk lesz a dolgozat további részében. A másodikban részletesen ismertetjük az általunk használt Wigner-kristály modellt, majd diszkutáljuk a következményeket, kitérünk a modell multiplett-szerkezetének ismertetésére, valamint

mágneses térben való viselkedésének kvalitatív leírására. A dolgozatot rövid összefoglaló zárja.

2. Alapok

Ebben a fejezetben áttekintünk pár alapvető fogalmat és elvégzünk néhány egyszerűbb számítást, melyekre szükségünk lesz a továbbiakban. Az itt található számítások már ismert eredmények, a nanocsövek szerkezetéről lásd például [2], a $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ perturbációs számításról pedig [7].

2.1. Szén nanocsövek szerkezete, az izospin

Nanocsövekben az elektronok a cső tengelye körül történő keringés következtében pályamomentummal ill. ebből adódóan orbitális mágneses momentummal is rendelkeznek. Mint látni fogjuk, az orbitális mágneses momentum kvantált, és félvezető nanocsövekben sohasem zérus. Egy $1/2$ -es spin szabadsági fokként viselkedik, ezért izospinnek nevezzük.

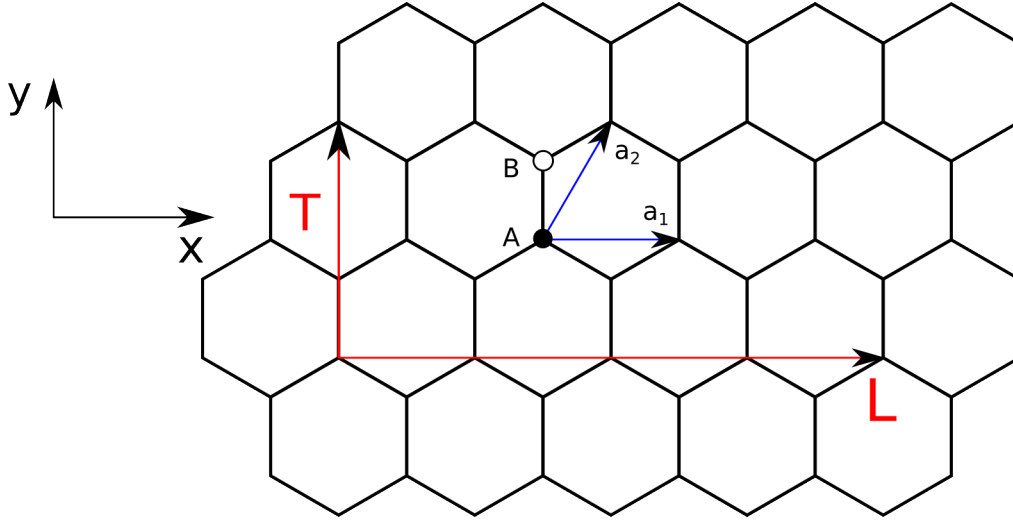
A nanocsőre úgy gondolhatunk, mintha az egyrétegű grafén egy darabját feltekertük volna egy tengely körül. Az 1. ábrán látható a grafén és a számunkra fontos mennyiségek. A grafén hatszögrácsában elemi cellánként két atom található, az ennek megfelelő két inekvivalens alrácstól A és B jelöli, míg az elemi rácsvektorok $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$, hosszuk $a = |\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2| \approx 0,24612$ nm.

A grafén Brillouin-zónájának két inekvivalens sarokpontja a $\mathbf{K}$ és $\mathbf{K}'$, az ún. Dirac-pontok. A vezetési és vegyértéksáv degenerált ebben a két pontban, ezért az alacsony energiás gerjesztések ezen két pont környezetében zajlanak. A spektrum lineáris a Dirac-pontok környezetében, ezek a Dirac-kúpok.

A cső kerületét az $\mathbf{L} = n\mathbf{a}_1 + m\mathbf{a}_2 \equiv (n, m)$ vektor jelöli ki. Az egyszerűség kedvéért a továbbiakban kizárólag ún. cikk-cakk nanocsövekkel foglalkozunk, azaz $m = 0$. Ilyenkor a cső sugara $R = \frac{na}{2\pi}$, a kerülete az x , a tengely pedig az y irányba esik. A felcsavart szén nanocsőben az origóból y irányba indulva az első ekvivalens szénatom helye:

$$\mathbf{T} = \sqrt{3}a \cdot \hat{\mathbf{y}}. \quad (1)$$

A nanocső elemi cellája tehát a $\mathbf{T}$ és $\mathbf{L}$ által kifeszített téglalap, Brillouin-zónája pedig a $\left[-\frac{\pi}{\sqrt{3}a}, \frac{\pi}{\sqrt{3}a}\right]$ intervallum. Az ebben szereplő sávokat megkaphatjuk a grafén elektronállapotaiból, azokat periodikus határfeltétellel a nanocsőre „felcsavarva”. Ezt szemlélteti a 2. ábra.

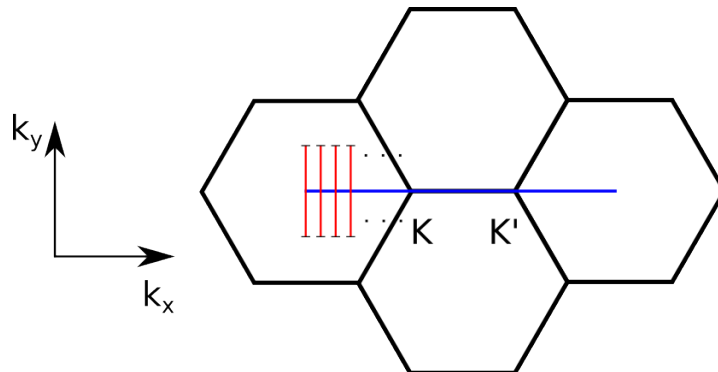


1. ábra. A grafén szerkezete: a két inekvivalens alrác A és B, az elemi rácsvektorok $\mathbf{a}_1$ és $\mathbf{a}_2$, a nanocső elemi celláját kijelölő $\mathbf{L}$ és $\mathbf{T}$ vektorok

A hullámszám kerület menti komponense kvantált, a tengely irányába mutató komponense viszont folytonos:

$$\begin{aligned} k_x &= \frac{2\pi}{na}l, \quad l \in \mathbb{N}, \\ k_y &\in \left[-\frac{\pi}{|T|}, \frac{\pi}{|T|} \right] = \left[-\frac{\pi}{\sqrt{3}a}, \frac{\pi}{\sqrt{3}a} \right]. \end{aligned} \quad (2)$$

azaz az általunk tárgyalt cikk-cakk nanocső összesen $2 \cdot 2n = 4n$ darab egydimenziós sávval rendelkezik, ami megfelel a 2. ábrán látható szakaszoknak. Két szomszédos szakasz távolsága $\frac{2\pi}{na} = \frac{1}{R}$, magasságuk éppen fele a hatszög magasságának. Ez lehetővé teszi, hogy Brillouin-zónának ne a szokásos hatszöget válasszuk, hanem a 3. ábra sze-



2. ábra. A grafén Brillouin-zónája a $\mathbf{K}, \mathbf{K}'$ Dirac-pontokkal. A piros szakaszok a nanocső diszperziós ágai.

rint átszabjuk és a kapott téglalappal dolgozzunk a továbbiakban, elkerülve ezzel, hogy a hatszög sarkainál lévő kis háromszögekből esetleg kilógó szakaszdarabokat tologatnunk kelljen. Legyen $n = 3k + \nu$, $\nu = 0, \pm 1, k \in \mathbb{Z}^+$. Ekkor az l . szakasz távolsága a $\mathbf{K}$ ponttól:

$$\frac{2\pi}{na} \left(l - \frac{2n}{3} \right) = \frac{2\pi}{na} \left(\underbrace{l - 2k}_{\in \mathbb{Z}} - \frac{2\nu}{3} \right). \quad (3)$$

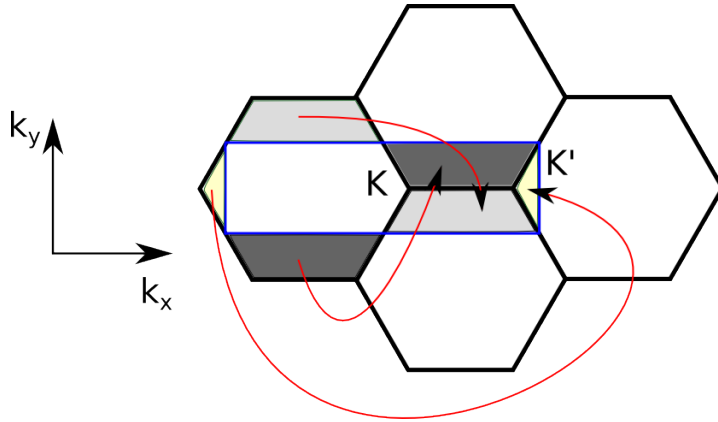
Ez azt jelenti, hogy $\nu = 0 \Leftrightarrow 3|n$ esetén a $2k$ -adik szakasz átmegy a $\mathbf{K}$ ponton (hasonlóan: a $4k$ -adik pedig a $\mathbf{K}'$ -n), vagyis a nanocső fémes. Ha viszont n nem osztható hárommal, nem metsszük át a Dirac-pontokat, és félvezető csövet kapunk, lásd 4. ábra. A továbbiakban erre az esetre szorítkozunk.

Legyen $\mathbf{Q} = \mathbf{K} + (\frac{\nu}{3R}, 0)$, ill. $\mathbf{Q}' = \mathbf{K}' + (\frac{-\nu}{3R}, 0)$, azaz a $\mathbf{K}$ -hoz ill. $\mathbf{K}'$ -höz legközelebb eső megengedett pont a k_x tengelyen. Ezek energiában degeneráltak, és az ehhez tartozó hullámfüggvények azonos nagyságú, de ellentétes irányú impulzusú kerület menti mozgást írnak le. A mozgásból eredő mágneses momentum a cső tengelye irányába mutat (egyik vagy másik irányba), nagysága csak n -től függ:

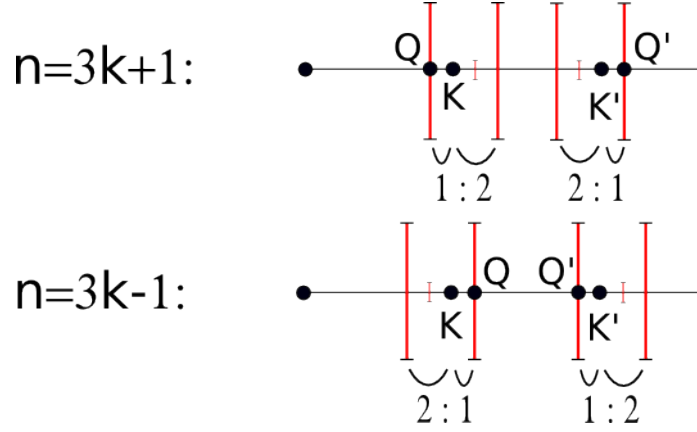
$$\mu_{\text{orb}} = \frac{1}{2} e (\hbar c) R, \quad (4)$$

ahol e az elemi töltés, $\hbar c$ pedig a Dirac-kúpok meredeksége. A gyakorlatban használt nanocsövekre ($n \sim 10 - 30$) ez 3 – 10-szer nagyobb a Bohr-magnetonnál.

A dolgozatban n -típusú félvezető nanocsövekkel foglalkozunk majd. Ekkor a kémiai potenciál a vezetési sáv alján helyezkedik el és $\nu \neq 0$. Tehát $k_B T \ll \frac{\hbar^2 Q_x^2}{2m}$ hőmérsékeleten az elektronok egy újabb szabadsági fokkal rendelkeznek, aszerint, hogy a $\mathbf{Q}$ vagy a $\mathbf{Q}'$ pontban vannak-e az impulzustérben, azaz $+y$ vagy $-y$ irányba mutat az orbitális mágneses momentumuk. Mivel ez hasonlóan viselkedik, mint egy $1/2$ -es spin szabadsági fok, **izospin**nek nevezzük, és a továbbiakban τ -val jelöljük.



3. ábra. A Brillouin-zóna átszabása



4. ábra. Félvezető nanocsövek alacsonyenergiás állapotai, K, K' a Dirac-pontok, Q, Q' a legkisebb energiás megengedett állapotok

2.2. A Wigner-kristály

A Wigner-kristály egy kölcsönható elektrongáz rácsba rendeződése alacsony elektronsűrűségeknél. Egy kritikus sűrűség alatt a Coulomb-taszítás energiája meghaladja az elektronok kinetikus energiáját, így energetikailag megéri lokalizálódniuk. Fontos hangsúlyozni, hogy az elektronok saját magukat kényszerítik be a rácsba, és a kialakuló struktúra független például az elektrongázt adó atomi rácstól.

Egy dimenzióban tehát akkor várhatunk Wigner-kristályt, ha $\frac{e^2}{\epsilon} n \gg \frac{\hbar^2}{m^*} n^2$, ahol m^* az elektronok effektív tömege, ϵ pedig a közeg dielektromos állandója. Bevezetve az effektív Bohr-sugarat, $a_B = \frac{\epsilon \hbar^2}{m^* e^2}$:

$$n \ll a_B^{-1} \Leftrightarrow r_s \equiv \frac{1}{na_B} \gg 1. \quad (5)$$

Ez természetesen csak egy nagyon naív kép, egy dimenzióban nem alakul ki valódi hosszútávú rend. Pontosabb térelméleti számolásokkal meg lehet mutatni, hogy a sűrűség-sűrűség korrelációs függvényben a szokásos $2k_F$ -es oszcilláció (Peierls instabilitás) mellett megjelenik egy minden hatványfüggvénynél lassabban lecsengő $4k_F$ -es is tag is [8]. Ez a periódus pontosan az átlagos elektron-elektron távolságnak felel meg, tehát nem áll távol a valóságtól a naív kép.

A Wigner-kristály kísérleti kimutatása azért nehéz, mert nagyon tiszta mintákra van szükség. Kvantum Monte-Carlo szimulációk alapján egy dimenzióban $r_s \gtrsim 10$ esetén várható a Wigner-kristály kialakulása [9]. Egy dimenzióban nem is olyan régen, 2008-ban sikerült először realizálni a Wigner-kristályt, szén nanocsőben [4]. Külső mágneses teret adva a mintára és változtatva az elektronsűrűséget, Coulomb-blokád spektroszkópia segítségével különféle spin és izospin rendeződéseket mutattak ki a szerzők.

2.3. A nanocső hullámfüggvényei: $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ perturbációszámítás

A Wigner-kristály állapot felépítéséhez szükségünk lesz a nanocső elektron hullámfüggvényeire. Ebben a fejezetben a grafén hullámfüggvényeiből kiindulva $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ perturbációszámítás alkalmazásával számítjuk ki őket. Az alfejezetben $\hbar = 1$ egységben dolgozunk.

Első lépésben megkonstruáljuk a grafén hullámfüggvényeit a Dirac-pontok közelében. Ha V egy rácsperiodikus potenciál, akkor Bloch ismert tétele szerint a

$$\left(\frac{p^2}{2m} + V \right) \Psi = \epsilon \Psi$$

Schrödinger-egyenlet megoldásai előállnak

$$\Psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

alakban, ahol az $u_{\mathbf{k}}$ rácsperiodikus függvény kielégíti a következő egyenletet:

$$\left(\frac{(\mathbf{p} + \mathbf{k})^2}{2m} + V \right) u_{\mathbf{k}} = \left(\frac{p^2}{2m} + V + \frac{1}{m} \mathbf{k}\mathbf{p} + \frac{k^2}{2m} \right) u_{\mathbf{k}} = \epsilon(\mathbf{k}) u_{\mathbf{k}}. \quad (6)$$

Feltéve, hogy ismertek az $u_{\mathbf{k}=0}$ függvények, a $\mathbf{k}\mathbf{p}/m$ tagot perturbációként kezelve, standard perturbációszámítással juthatunk $u_{\mathbf{k}}$ -hoz (belátható, hogy az $u_{\mathbf{k}=0}$ függvények teljes rendszert alkotnak). Ez a $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ perturbációszámítás. Látható, hogy mivel a perturbáció arányos $\mathbf{k}$ -val, várhatóan kis $\mathbf{k}$ -ra lesz pontos. A módszer ebben a formában a Brillouin-zóna Γ pontjánál használható.

Mi a $\mathbf{K}$ és $\mathbf{K}'$ pontok közelében szeretnénk alkalmazni, ezért egy kicsit alakítanunk kell a fenti képletet. Legyen $\mathbf{K}$ körül $\mathbf{k} = \mathbf{K} + \mathbf{q}$. Ekkor (6) a következő alakra hozható:

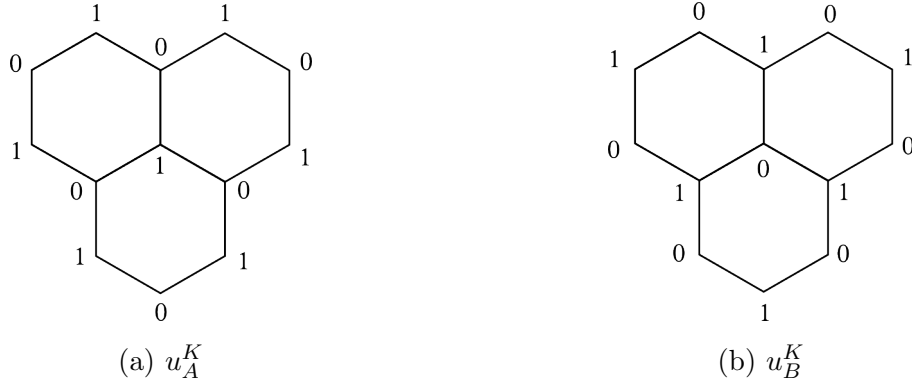
$$\left(\underbrace{\frac{(\mathbf{p} + \mathbf{K})^2}{2m} + V}_{H_K} + \underbrace{\frac{1}{m} (\mathbf{p} + \mathbf{K}) \mathbf{q} + \frac{q^2}{2m}}_{H'} \right) u_{\mathbf{K}+\mathbf{q}} = \epsilon(\mathbf{K} + \mathbf{q}) u_{\mathbf{K}+\mathbf{q}}. \quad (7)$$

H' -t perturbációként kezeljük. A $\mathbf{q} = 0$ pontban H_K spektruma kétszeresen degenerált, és a Schrödinger-egyenlet egy $\Psi_A^K(\mathbf{r})$ ill. $\Psi_B^K(\mathbf{r})$, az A ill. B alrácsra lokalizált megoldással rendelkezik. Ennek megfelelően az $u_A^K(\mathbf{r}) = e^{-i\mathbf{K}\mathbf{r}} \Psi_A^K(\mathbf{r})$ és $u_B^K(\mathbf{r}) = e^{-i\mathbf{K}\mathbf{r}} \Psi_B^K(\mathbf{r})$ által kifeszített altérben fogunk degenerált perturbációszámítást végezni.

Az u_A^K, u_B^K Bloch-függvények ortonormáltak. Szoros kötésű közelítésben a következő alakot öltik:

$$u_{A,B}^K(\mathbf{r}) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{R} \in \mathbf{R}_{A,B}} e^{i\mathbf{K}(\mathbf{R}-\mathbf{r})} \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{R}), \quad (8)$$

ahol N az elemi cellák száma, $\mathbf{R}_A, \mathbf{R}_B$ a két alrács helyvektorai, φ pedig a grafén síkjára merőleges atomi p-pálya. Az egyes p-pályák amplitudóit az 5. ábrán láthatjuk.



5. ábra. A p-pályák amplitudói az u_A^K, u_B^K Bloch-függvényekben

A szoros kötésű közelítésben kifejezhetjük H' mátrixelemeit:

$$\langle u_A^K | H' | u_A^K \rangle = \frac{q^2}{2m} + \frac{1}{m} \mathbf{K} \mathbf{q} + \frac{\mathbf{q}}{m} \cdot \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{R}_A} \int d^3 r \left(e^{i\mathbf{K}(\mathbf{R}_A - \mathbf{r})} \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_A) \right)^* \mathbf{p} \left(e^{i\mathbf{K}(\mathbf{R}_A - \mathbf{r})} \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_A) \right), \quad (9)$$

ahol a másodszojzsedos hullámfüggvények átfedését elhanyagoltuk. Az impulzus-operátor mindkét tényezőre hat:

$$\mathbf{p} \left(e^{i\mathbf{K}(\mathbf{R}_A - \mathbf{r})} \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_A) \right) = -\mathbf{K} \cdot e^{i\mathbf{K}(\mathbf{R}_A - \mathbf{r})} \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_A) + e^{i\mathbf{K}(\mathbf{R}_A - \mathbf{r})} \mathbf{p} \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_A). \quad (10)$$

Visszaírva ezt a (9) egyenletbe:

$$\langle u_A^K | H' | u_A^K \rangle = \frac{q^2}{2m} + \frac{1}{m} \mathbf{K} \mathbf{q} + \frac{1}{m} (\pi - \mathbf{K}) \mathbf{q} = \frac{q^2}{2m}, \quad (11)$$

hiszen szimmetria okok miatt $\pi = \int d^3 r \varphi(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{p} \varphi(\mathbf{r}) = 0$. Teljesen analóg módon kapjuk a másik diagonális mátrixelemet:

$$\langle u_B^K | H' | u_B^K \rangle = \frac{q^2}{2m}. \quad (12)$$

Az off-diagonális elemekben csak az impulzusfüggő tag ad járulékot: $\langle u_A^K | H_K | u_B^K \rangle = \frac{\mathbf{q}}{m} \langle u_A^K | \mathbf{p} | u_B^K \rangle$. Szoros kötésű közelítésben a következőt kapjuk:

$$\begin{aligned} \langle u_A^K | H' | u_B^K \rangle &= \frac{\mathbf{q}}{m} \cdot \frac{1}{N} \int d^3 r \sum_{\mathbf{R}_A, \mathbf{R}_B} \left(e^{i\mathbf{K}(\mathbf{R}_A - \mathbf{r})} \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_A) \right)^* \mathbf{p} \left(e^{i\mathbf{K}(\mathbf{R}_B - \mathbf{r})} \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_B) \right) = \\ &= \frac{\mathbf{q}}{m} \cdot \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{R}_A, \mathbf{R}_B} e^{i\mathbf{K}(\mathbf{R}_B - \mathbf{R}_A)} \underbrace{\int d^3 r \varphi^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_A) \cdot \mathbf{p} \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_B)}_{=0}. \end{aligned} \quad (13)$$

A jelölt kifejezés csak akkor ad lényeges járulékot, ha $\mathbf{R}_A$ és $\mathbf{R}_B$ szomszédos rácspontokat jelöl, szimmetria okokból ebben az esetben viszont $\mathbf{R}_A - \mathbf{R}_B$ irányába mutat. Legyen tehát

$$-iP\boldsymbol{\delta} \equiv \int d^3r \varphi^*(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{p} \varphi(\mathbf{r} - \boldsymbol{\delta}). \quad (14)$$

Ezzel:

$$\langle u_A^K | H' | u_B^K \rangle = \frac{\mathbf{q}}{m} \underbrace{\sum_{\boldsymbol{\delta}} e^{i\mathbf{K}\boldsymbol{\delta}} \cdot \boldsymbol{\delta}}_{\frac{\sqrt{3}}{2}a(i,1)} (-iP) = \frac{\sqrt{3}}{2} a \frac{P}{m} (q_x - iq_y) \equiv c \cdot (q_x - iq_y), \quad (15)$$

ahol $c = \frac{\sqrt{3}}{2} a \frac{P}{m}$. Teljesen hasonlóan: $\mathbf{K}'$ körül legyen $\mathbf{k} = \mathbf{K}' - \mathbf{q}$. A diagonális tagok analóg módon kaphatók. Az off-diagonális tagoknál pedig annyi különbség lesz (15)-höz képest, hogy a jelölt összeg komplex konjugáltja fog szerepelni (hiszen $\mathbf{K}$ helyett $\mathbf{K}'$ áll az exponensben). Tehát a mátrixelemek:

$$\begin{aligned} \langle u_A^{K'} | H' | u_A^{K'} \rangle &= \langle u_B^{K'} | H' | u_B^{K'} \rangle = \frac{q^2}{2m}, \\ \langle u_A^{K'} | H' | u_B^{K'} \rangle &= \frac{\sqrt{3}}{2} a \frac{P}{m} (q_x + iq_y). \end{aligned} \quad (16)$$

Bevezetve a $q_{\pm} = q_x \pm iq_y$ jelölést, az effektív Hamilton-operátor így a következő alakot ölti:

$$H_{\text{eff}} = c \cdot \left[\begin{array}{cc|cc} \frac{q^2}{2m} & q_- & 0 & 0 \\ q_+ & \frac{q^2}{2m} & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & \frac{q^2}{2m} & q_+ \\ 0 & 0 & q_- & \frac{q^2}{2m} \end{array} \right]. \quad (17)$$

Csak a $\mathbf{q}$ -ban lineáris tagokat megtartva kapjuk a jól ismert diszperziókat (Dirac-kúpok) ill. sajátvektorokat:

$$\begin{aligned} \epsilon_{\mathbf{K}+\mathbf{q}} &= \pm c|\mathbf{q}| \quad \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1, \pm \frac{q_x + iq_y}{|\mathbf{q}|} \right), \\ \epsilon_{\mathbf{K}'-\mathbf{q}} &= \pm c|\mathbf{q}| \quad \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1, \pm \frac{(q_x - iq_y)}{|\mathbf{q}|} \right). \end{aligned}$$

Szén nanocsőben a hullámszám x komponense kvantált a (2) egyenlet szerint. Cikk-cakk nanocsőben a legalacsonyabb energiás megoldást a $q_x = \frac{\nu}{3R}$, $q_y = 0$ adja, azaz ha a $\mathbf{Q}$ ill. $\mathbf{Q}'$ pontokban vagyunk. Ekkor a hullámfüggvények periodikus része:

$$u_\nu(\mathbf{r}) \equiv u_{\mathbf{Q}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{Q}'}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}} u_A(\mathbf{r}) \pm \frac{\nu}{\sqrt{2}} u_B(\mathbf{r}) \quad (18)$$

Vegyük észre, hogy a két alrács relatív fázisa ν -tól, azaz n -től függ, de a két minimum-pontban ugyanaz adott n esetén. Ez fontos lesz a későbbiekben. A nanocső legalsó sávjának aljánál a Bloch-függvényt u_ν -vel közelítve, a hullámfüggvényre a következőt kaptuk:

$$\Psi_{\tau, q_y}(\mathbf{r}) = e^{i(Q\tau\varphi + q_y y)} u_\nu(\mathbf{r}), \quad (19)$$

ahol $\mathbf{r} = (x, y) = (R\varphi, y)$, $\tau = \pm 1$ az izospin-index, $\tau Q = Q_x$ vagy $\tau Q = Q'_x$.

Az alsó sáv elektronjainak effektív tömegtenzorát a diszperziós relációból határozhatjuk meg. Egyedül az yy komponens ad járulékot, hiszen egy sávon belül az elektron nem mozgathat x irányba:

$$m^* = \frac{|K_x - Q_x|}{c}. \quad (20)$$

Ezzel a nanocső két degenerált alsó sávjának a diszperziója:

$$\epsilon_\tau(q_y) = \sqrt{c^2 q_y^2 + (m^*)^2 c^4}, \quad (\tau = \pm 1). \quad (21)$$

2.4. Hullámcsomagok

Ahogy elkezdjük betölteni a vezetési sávot, az első elektron a tengely mentén még az egész nanocsőre delokalizálódik, de amint egyesével hozzáadjuk az újabb elektronokat, a hullámfüggvényeik elkezdenek lokalizálódni. A jelenség leírására hullámcsomagokat készítünk a (19) hullámfüggvényekből (egyelőre a $\mathbf{K}$ pont körül, $\mathbf{K}'$ -re analóg módon járunk el). Alacsony hőmérséklet esetén elegendő a legalacsonyabb energiájú sávot figyelembe vennünk:

$$\Psi = \int dq_y e^{i(\mathbf{K}+\mathbf{q})\mathbf{r}} u_\nu(\mathbf{r}) \cdot f(\mathbf{q}), \quad (22)$$

ahol $f(\mathbf{q}) = \mathcal{N} e^{-q_y^2/(2q_0^2)}$, a hullámcsomagok spektrális összetételét leíró egységnyire normált burkolófüggvény. A q_y szerinti integrált elvileg a teljes Brillouin-zónára kellene elvégezni: $-\pi/a\sqrt{3} \leq q_y \leq \pi/a\sqrt{3}$. Azonban f -et meglehetősen lokalizálnak kell, hogy válasszuk, mivel már csak eleve a Q_x -en átmenő, legalacsonyabb energiájú sávot vettük figyelembe, így $|q_y| > |Q_x|$ tartományban f erősen levág. Ez azt jelenti, hogy a hullámcsomag tengely irányú kiterjedése jóval nagyobb a cső R sugaránál. Mivel n növelésével Q_x monoton csökken, nem túl nagy n -ekre is gyakorlatilag a $\mathbf{Q}$ pont közelében kell elvégeznünk az

integrált, ezért jogos az a közelítésünk, hogy az integrálba eleve u_ν -t írunk $u_{\mathbf{K}+\mathbf{q}}$ helyett. Elvégezve az integrált:

$$\Psi = e^{iQ_x R\varphi} \cdot u_{\mathbf{Q}}(\mathbf{r}) \cdot e^{-\frac{y^2}{2y_0^2}}. \quad (23)$$

Hasonlóan a másik völgyben:

$$\Psi = e^{iQ'_x R\varphi} \cdot u_{\mathbf{Q}'}(\mathbf{r}) \cdot e^{-\frac{y^2}{2y_0^2}}. \quad (24)$$

Tehát a Wigner-kristály elektronjainak egyrészezske alapállapotú hullámfüggvényére a következő közelítést kaptuk:

$$\Psi_{j\tau\sigma}(y, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{iQ R\tau\varphi} \cdot \phi(y - y_j^{(0)}) \cdot u_\nu(y, \varphi) \cdot \chi, \quad (25)$$

ahol

$$\phi(y) = \left(\frac{1}{\pi y_0^2} \right)^{1/4} e^{-\frac{y^2}{2y_0^2}},$$

$$\int |\phi|^2 = 1,$$

χ a spinhullámfüggvény, $\tau = \pm 1$ az izospin index, $\tau Q = Q_x$ vagy Q'_x , $y_j^{(0)}$ pedig a Wigner-kristály j . rácshelyét jelöli. Szemléletesen úgy képzelhetjük el, hogy a nanocső hullámfüggvényeit moduláljuk egy gyorsan oszcilláló taggal, mely szétkeni az elektronokat a kerület mentén, a tengely mentén pedig az elektronok d távolságra y_0 karakterisztikus kiterjedéssel lokalizálva vannak.

3. A modell

Az alábbiakban ismertetjük a szén nanocsőben kialakult Wigner-kristály leírására szolgáló modellünket. Célunk, hogy leírjuk az elektronok kicserélődési kölcsönhatását, feltérképezzük annak spintől és izospintől való függést. Hartree-közelítésben meghatározzuk az elektronok által keltett effektív potenciált. A kicserélődési kölcsönhatás leírásához először egy kétrészezske problémát vizsgálunk, a teljes rendszert ennek segítségével modellezzük.

3.1. Hartree-közelítés

Az N darab kölcsönható elektront leíró Hamilton-operátor:

$$H = \sum_{i=1}^N -\frac{1}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \sum_{i<j} u(y_{ij}, \varphi_{ij}), \quad (26)$$

ahol $u(y, \varphi)$ a Coulomb-potenciál, $y_{ij} = y_i - y_j$, $\varphi_{ij} = \varphi_i - \varphi_j$. A potenciál alakjának meghatározásakor figyelembe vesszük a hengeres nanocső-geometriát. Mivel a nanocső (y_1, φ_1) és (y_2, φ_2) pontjainak a távolsága:

$$\sqrt{R^2 \sin^2 \varphi_{12} + R^2(1 - \cos \varphi_{12})^2 + y_{12}^2} = \sqrt{y_{12}^2 + 2R^2(1 - \cos \varphi_{12})}, \quad (27)$$

így a Coulomb-potenciál:

$$u(y, \varphi) = \frac{e^2}{\epsilon} \frac{1}{\sqrt{y^2 + 2R^2(1 - \cos \varphi)}}. \quad (28)$$

Hartree-közelítésben az i . elektronra ható effektív Hamilton-operátor:

$$H_{\text{eff}}^i = -\frac{1}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \sum_{\substack{j \neq i \\ \tau \sigma}} \int dy' d\varphi' u(y - y', \varphi - \varphi') |\Psi_{j\tau\sigma}(y', \varphi')|^2. \quad (29)$$

Feltesszük, hogy kialakult a Wigner-kristály, a rácslátlándója d , a rácspontok:

$$y_n^{(0)} = (2n - 1) \frac{d}{2} \quad n \in \mathbb{Z}. \quad (30)$$

A Wigner-kristály fázisban az egyes elektronok hullámfüggvényei lokalizáltak, így a (29) egyenletben $|\Psi_{j\tau\sigma}(z', \varphi')|^2 \approx \frac{1}{2\pi} \delta(y - y_j^{(0)})$. Ezzel az i . elektronra ható effektív potenciálra a következőt kapjuk:

$$V_i(y) = \sum_{j \neq i} u_0(y - y_j^{(0)}), \quad (31)$$

ahol

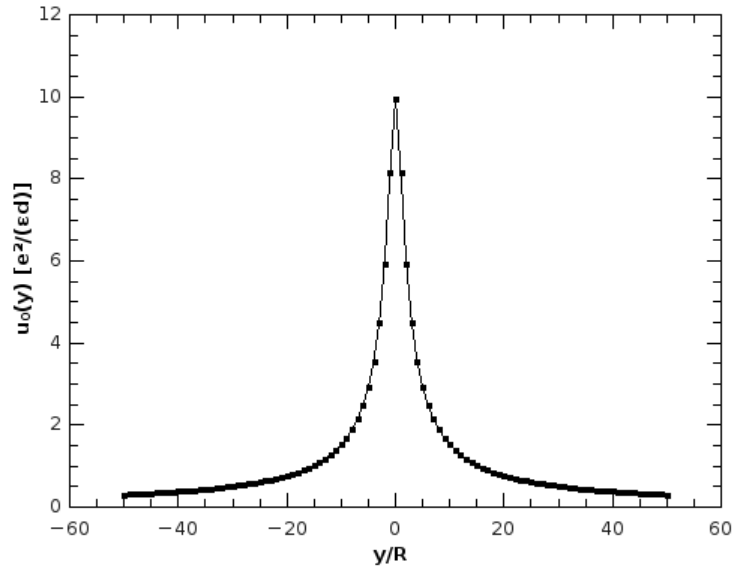
$$u_0(y) = \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} u(y, \varphi) \quad (32)$$

a Wigner-kristály egy elektronja által keltett potenciál. A nanocső véges átmérőjét modellezendő, bevezetünk egy R -es levágást, azaz y^2 helyére $y^2 + R^2$ -et írunk. A kapott potenciálok a 6. ábrán láthatóak. A (32) integrál nem végezhető el analitikusan, de a numerikus számítások megkönnyítése céljából kicsit tovább alakítottuk:

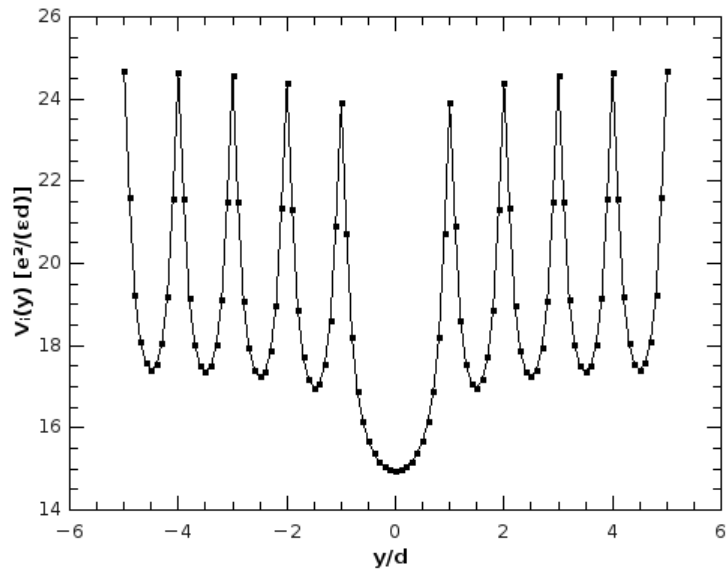
$$u_0(y) = \frac{e^2}{\epsilon} \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} \frac{1}{\sqrt{y^2 + R^2 + 4R^2 \sin^2(\varphi/2)}} = \frac{2e^2}{\epsilon\pi\sqrt{y^2 + R^2}} K\left(-\frac{4R^2}{y^2 + R^2}\right), \quad (33)$$

ahol

$$K(k) = \int_0^{\pi/2} dx \frac{1}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 x}} \quad (34)$$



(a) Egy rácshely potenciálja



(b) Az i . elektronra ható effektív potenciál
($y_i^{(0)} = 0$)

6. ábra. A Hartree-közelítésben kapott potenciálok, $2\pi R/a = 10$

a teljes elsőfajú elliptikus integrál. Világos az (33) egyenletből, hogy u_0 aszimptotikus lecsengése:

$$u_0(y \gg R) \approx \frac{e^2}{\epsilon|y|}. \quad (35)$$

Hogy a számolásunk konzisztens legyen, fontos ellenőriznünk, hogy a Wigner-kristály egy elektronjának mekkora az egyensúlyi helyétől való y_0 átlagos kitérése. Eddig kihasználtuk az elektronok lokalizáltságát, azaz $y_0 \ll d$ fenn kell, hogy álljon. Másrészt az izospin bevezetésekor csak a Dirac-pontokhoz legközelebb eső diszperziókat vettük figyelembe, ami maximalizálja az elektronok tengelyirányú hullámszámát, azaz alsó korlátot ad a rácsponton lévő elektronok lokalizáltságára. Figyelembe véve a diszperziók elhelyezkedését (2. és 4. ábra), a következő feltételhez jutunk:

$$c\sqrt{|K_x - Q_x|^2 + k_y^2} \leq c \cdot \sqrt{(2|K_x - Q_x|)^2 + 0} \Leftrightarrow k_y \leq \sqrt{3}|K_x - Q_x| = \frac{1}{\sqrt{3}R} \Leftrightarrow (36)$$

$$y_0 \geq \sqrt{3}R.$$

Azaz a számolásunk akkor helyes, ha $y_0/R > \sqrt{3}$ és $y_0 \ll d$ egyidejűleg fennáll. A maximális elektronsűrűség meghatározásához többféle átmérőjű nanocsőre, széles elektronsűrűség-tartományon kiszámoltuk y_0 -t, a V_i potenciál $y_i^{(0)}$ körüli sorbafejtésével. Az eredményeket a 7. ábrán látjuk. A különböző átmérőjű nanocsövekre számolt y_0/R illetve $y_0/d = y_0 \cdot n_e$ értékeket $n_e \cdot R$ függvényében ábrázolva, a görbék nagyon pontosan egymásra skálázódnak. Látható, hogy az első feltétel jelenti az erősebb megszorítást az elektronsűrűségekre. Leolvassa az $y_0/R = \sqrt{3}$ -hoz tartozó sűrűséget, azt kapjuk, hogy

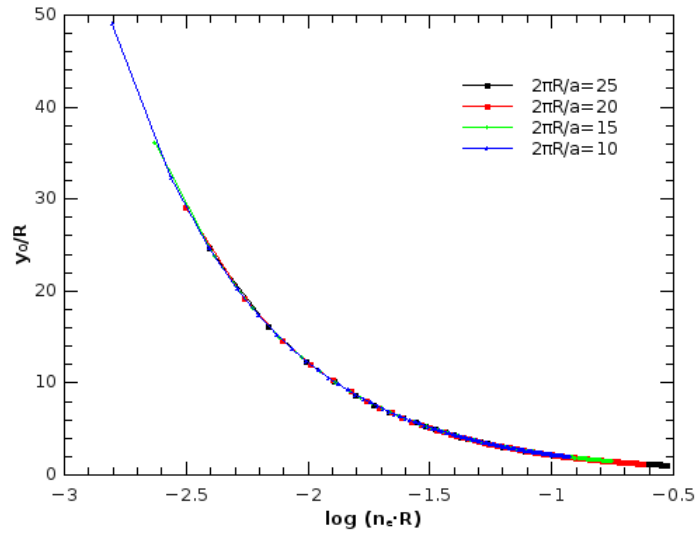
$$\log(n_e \cdot R) \lesssim -0,8489 \Leftrightarrow \frac{d}{R} \gtrsim 7. \quad (37)$$

Ez a feltétel valamivel szigorúbb, mint (5). Híg határesetben $y_0 \sim (n_e R)^{-3/4}$, amit vártunk is, mivel (29) és (25) szerint az elektronok kinetikus energiája arányos $\frac{1}{2m^*} \cdot \frac{1}{y_0^2}$ -tel, továbbá (31)-et sorbafejtve $y_0^{(0)}$ körül, látható, hogy a potenciális energia $e^2/\epsilon_0 \cdot y_0^2/d^3$ szerint skálázódik. A Wigner-kristály egyensúlyi állapotában a két energia egyenlő, amiből valóban $y_0 \sim (n_e R)^{-3/4}$ adódik.

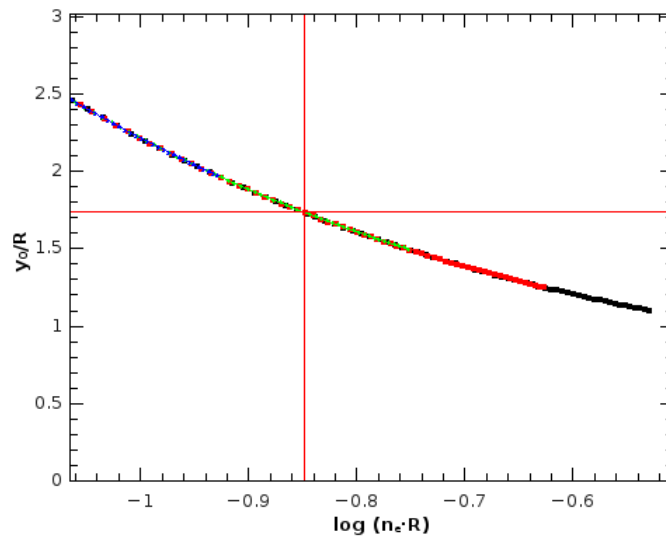
3.2. A kicserélődési kölcsönhatás

A kicserélődési kölcsönhatás meghatározásához túl kell lépnünk a Hartree-közelítésen. Először csak a $\pm d/2$ helyen lévő elektronok kicserélődési kölcsönhatását számoljuk ki, ezért ezeket az elektronokat szabadnak tekintjük, a többi elektron hatását a Hartree-közelítésben kapott effektív potenciállal vesszük figyelembe. A két elektronból álló rendszert leíró Hamilton-operátor:

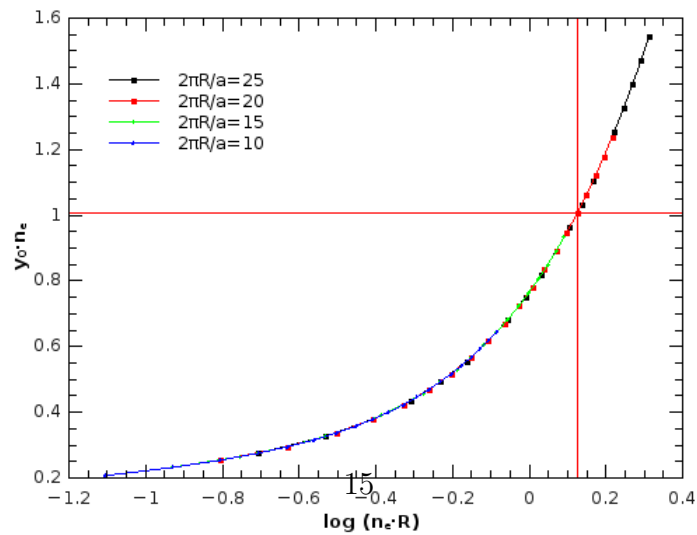
$$H = -\frac{1}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial y_1^2} - \frac{1}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial y_2^2} + V(y_1) + V(y_2) + u(y_{12}) \equiv H_0 + u(y_{12}) \quad (38)$$



(a) y_0/R az elektronsűrűség függvényében, többféle átmérőjű nanocsövekre



(b) y_0/R a kritikus $y_0/R \sim \sqrt{3}$ tartomány közelében



(c) $y_0 \cdot n_e$ az elektronsűrűség függvényében

ahol $y_{12} = y_1 - y_2$, $V = \sum_{n \neq 0,1} u_0(y - y_n^{(0)})$ a rögzített elektronok által biztosított „háttér”.

A (25) egyrészezske hullámfüggvényekből kétrészezske állapotokat készítünk tehát. Leválasztjuk az izospin-részt, a maradék szorzatát $\Phi_{\tau_1, \tau_2}^{\sigma_1, \sigma_2}(y_1, y_2, \varphi_1, \varphi_2)$ -vel jelöljük. A $\varphi_{1,2}$ függést kizárólag az atomi hullámfüggvény, u_ν okozza, lásd (25). Ezt első közelítésben elhanyagoljuk, így Φ már csak y_1, y_2 -től fog függeni. Az elhanyagolás jogosságát később vizsgáljuk. A következőt kapjuk tehát:

$$|\Psi\rangle = \sum_{\{\tau\}, \{\sigma\}} \int dy_1 \int dy_2 \int d\varphi_1 \int d\varphi_2 \Phi_{\tau_1, \tau_2}^{\sigma_1, \sigma_2}(y_1, y_2) \cdot e^{iQR\tau_1\varphi_1} e^{iQR\tau_2\varphi_2} |y_1, \varphi_1, \sigma_1\rangle |y_2, \varphi_2, \sigma_2\rangle. \quad (39)$$

Hogy az effektív Hamilton-operátort megkapjuk, számoljuk ki H hatását erre az állapotr! Legyen $H|\Psi\rangle \equiv |\tilde{\Psi}\rangle$.

$$\begin{aligned} \tilde{\Phi}_{\tau_1, \tau_2}^{\sigma_1, \sigma_2}(y_1, y_2) &= \int \frac{d\varphi_1}{2\pi} \int \frac{d\varphi_2}{2\pi} e^{-iQR\tau_1\varphi_1} e^{-iQR\tau_2\varphi_2} \left(\langle y_1, \varphi_1, \sigma_1 | \langle y_2, \varphi_2, \sigma_2 | \right) H |\Psi\rangle = \\ &= \int \frac{d\varphi_1}{2\pi} \int \frac{d\varphi_2}{2\pi} e^{-iQR\tau_1\varphi_1} e^{-iQR\tau_2\varphi_2} \cdot \sum_{\tau'_1, \tau'_2} e^{iQR\tau'_1\varphi_1} e^{iQR\tau'_2\varphi_2} \times \\ &\quad \left[H_0 \Phi_{\tau'_1, \tau'_2}^{\sigma_1, \sigma_2}(y_1, y_2) + U(y_1 - y_2, \varphi_1 - \varphi_2) \Phi_{\tau'_1, \tau'_2}^{\sigma_1, \sigma_2}(y_1, y_2) \right] = \\ &= H_0 \Phi_{\tau_1, \tau_2}^{\sigma_1, \sigma_2} + \sum_{\tau'_1, \tau'_2} \int \frac{d\varphi_1}{2\pi} \int \frac{d\varphi_2}{2\pi} e^{iQR(\tau'_1 - \tau_1)\varphi_1} e^{iQR(\tau'_2 - \tau_2)\varphi_2} \times \\ &\quad u(y_1 - y_2, \varphi_1 - \varphi_2) \Phi_{\tau'_1, \tau'_2}^{\sigma_1, \sigma_2}(y_1, y_2), \end{aligned} \quad (40)$$

ahol $H_0 = -\frac{1}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial y_1^2} - \frac{1}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial y_2^2} + V(y_1) + V(y_2)$. A $\varphi_1 = \varphi_{12} + \varphi_2$ változócsere után φ_2 szerint ki tudunk integrálni:

$$\int \frac{d\varphi_2}{2\pi} e^{iQR(\tau'_1 + \tau'_2 - \tau_1 - \tau_2)} = \delta_{\tau_1 + \tau_2, \tau'_1 + \tau'_2}, \quad (41)$$

azaz a kölcsönhatás során a teljes izospin megmaradó mennyiség! A következőt kapjuk tehát:

$$\begin{aligned} \tilde{\Phi}_{\tau_1, \tau_2}^{\sigma_1, \sigma_2}(y_1, y_2) &= H_0 \Phi_{\tau_1, \tau_2}^{\sigma_1, \sigma_2} + \\ &\quad \sum_{\tau'_1, \tau'_2} \delta_{\tau_1 + \tau_2, \tau'_1 + \tau'_2} \cdot \Phi_{\tau'_1, \tau'_2}^{\sigma_1, \sigma_2}(y_1, y_2) \cdot \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi_{12}}{2\pi} e^{iQR(\tau'_1 - \tau_1)\varphi_{12}} \cdot u(y_1 - y_2, \varphi_{12}). \end{aligned} \quad (42)$$

Attól függően, hogy τ_1 és τ'_1 megegyezik, vagy ellentétes, az integrál értéke vagy $u_0(y_{12})$ vagy

$$u_{2q}(y_{12}) \equiv \int \frac{d\varphi}{2\pi} e^{i2QR\varphi} \cdot u(y_{12}, \varphi) = \int \frac{d\varphi}{2\pi} \cos(2QR\varphi) \cdot u(y_{12}, \varphi). \quad (43)$$

Mivel u páros a második változójában, így u_{2q} valós. Numerikus meghatározását a függelékben ismertetjük.

Elhagyva a spin indexeket (a Coulomb-kölcsönhatás nem hat a spinekre) a következő effektív Schrödinger-egyenlethez jutunk:

$$E \begin{bmatrix} \Phi_{++} \\ \Phi_{+-} \\ \Phi_{-+} \\ \Phi_{--} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} H_0 + u_0(y_{12}) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & H_0 + u_0(y_{12}) & u_{2q}(y_{12}) & 0 \\ 0 & u_{2q}(y_{12}) & H_0 + u_0(y_{12}) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & H_0 + u_0(y_{12}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Phi_{++} \\ \Phi_{+-} \\ \Phi_{-+} \\ \Phi_{--} \end{bmatrix}. \quad (44)$$

A Φ_{+-}, Φ_{-+} altérben báziscserét hajtunk végre, hogy diagonális alakra hozzuk a Hamilton-operátort:

$$\Phi_{(S)/(A)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Phi_{+-} \pm \Phi_{-+}). \quad (45)$$

A négy altér, $++$, $--$, (S) , (A) különböző effektív Hamilton-operátorral írható le, ezeket vesszük most sorra.

$++$, $--$ altér. $H_{\text{eff}} = H_0 + u(y_{12})$. Izospin-triplett altér, $T = 1, T_z = \pm 1$, így a kétrészecske-hullámfüggvény izospin-része páros. A $S = 0$ spin-szingulett állapot lesz az alapállapot, mert ekkor lesz a hullámfüggvény térbeli része páros, míg az $S = 1$ spin-triplett lesz az első gerjesztett állapot. Az alapállapot $2 \times 1 = 2$ -szeresen, míg a gerjesztett állapot $2 \times 3 = 6$ -szorosan degenerált.

(S) altér. $H_{\text{eff}} = H_0 + u(y_{12}) + u_{2q}(y_{12})$. Izospin-triplett altér, $T = 1, T_z = 0$. Mivel ez is páros hullámfüggvényt jelent az izospin szektorban, most is az $S = 0$ lesz az alapállapot, de értelemszerűen a degenerációfokok most 1 ill. 3.

(A) altér. $H_{\text{eff}} = H_0 + u(y_{12}) - u_{2q}(y_{12})$. Izospin-szingulett altér, $T = 0, T_z = 0$. Ennek megfelelően $S = 1$ lesz az alapállapot (3-szorosan degenerált), az első gerjesztett állapot pedig az $S = 0$ (nem degenerált).

Most már minden szükséges összetevő a kezünkben van ahhoz, hogy meghatározzuk a kicserélődési kölcsönhatás spintől és izospintól való függését. Ehhez vezessük be az egyes izospin-alterekre való projekciókat:

$$\begin{aligned}
P^{++} + P^{--} &= \frac{1}{2} + 2\tau_1^z \tau_2^z \\
P^{(S)} &= \frac{1}{2}(\tau_1^+ \tau_2^- + \text{h.c.}) - \tau_1^z \tau_2^z + \frac{1}{4} = \boldsymbol{\tau}_1 \boldsymbol{\tau}_2 - 2\tau_1^z \tau_2^z + \frac{1}{4} \\
P^{(A)} &= -\frac{1}{2}(\tau_1^+ \tau_2^- + \text{h.c.}) - \tau_1^z \tau_2^z + \frac{1}{4} = -\boldsymbol{\tau}_1 \boldsymbol{\tau}_2 + \frac{1}{4}
\end{aligned} \tag{46}$$

Teljesen hasonlóan az egyes spinállapotokra történő projekciók:

$$\begin{aligned}
P_{S=1} &= \mathbf{S}_1 \mathbf{S}_2 + \frac{3}{4} = \frac{1}{2} (X_{12}^S + 1) \\
P_{S=0} &= -\mathbf{S}_1 \mathbf{S}_2 + \frac{1}{4} = \frac{1}{2} (-X_{12}^S + 1),
\end{aligned} \tag{47}$$

ahol bevezettük az $X_{ij}^S = 2\mathbf{S}_i \mathbf{S}_j + 1/2$ operátort. Könnyű látni, hogy ez megcseréli az i . és j . helyen lévő részecske spinjét, (függetlenül azok értékétől), ezért spinkicserélő operátorként fogunk rá hivatkozni. Az egyszerűség kedvéért ha S és T egy spin- ill. izospin szektorban ható operátor, akkor az együttes hatásukat $S \otimes T$ helyett ST -vel jelöljük. Így az egyes izospin-alterekben az kicserélődési kölcsönhatásra a következőket kapjuk:

$++$, $--$ altér:

$$\begin{aligned}
(P^{++} + P^{--})P_{S=1}E_{S=1}^{++} + (P^{++} + P^{--})P_{S=0}E_{S=0}^{++} = \\
\frac{1}{4}(E_{S=0}^{++} + E_{S=1}^{++}) + \frac{1}{4}(E_{S=1}^{++} - E_{S=0}^{++})X_{12}^S + \\
(E_{S=1}^{++} + E_{S=0}^{++})\tau_1^z \tau_2^z + (E_{S=1}^{++} - E_{S=0}^{++})X_{12}^S \tau_1^z \tau_2^z,
\end{aligned} \tag{48}$$

(S) és (A) altér:

$$\begin{aligned}
P^{(S)}P_{S=0}E_{S=0}^{(S)} + P^{(S)}P_{S=1}E_{S=1}^{(S)} + P^{(A)}P_{S=1}E_{S=1}^{(A)} + P^{(A)}P_{S=0}E_{S=0}^{(A)} = \\
\frac{1}{8}(E_{S=0}^{(S)} + E_{S=1}^{(S)} + E_{S=0}^{(A)} + E_{S=1}^{(A)}) + \frac{1}{8}(E_{S=1}^{(S)} - E_{S=0}^{(S)} + E_{S=1}^{(A)} - E_{S=0}^{(A)})X_{12}^S - \\
(E_{S=0}^{(S)} + E_{S=1}^{(S)})\tau_1^z \tau_2^z + (E_{S=0}^{(S)} - E_{S=1}^{(S)})X_{12}^S \tau_1^z \tau_2^z + \\
\frac{1}{2}(E_{S=0}^{(S)} + E_{S=1}^{(S)} - E_{S=0}^{(A)} - E_{S=1}^{(A)})\boldsymbol{\tau}_1 \boldsymbol{\tau}_2 + \frac{1}{2}(E_{S=1}^{(S)} - E_{S=0}^{(S)} + E_{S=0}^{(A)} - E_{S=1}^{(A)})X_{12}^S \boldsymbol{\tau}_1 \boldsymbol{\tau}_2.
\end{aligned} \tag{49}$$

A két elektron kicserélődési kölcsönhatását leíró Hamilton-operátor a fentiek összegeként áll elő. Némi műveletvégzés után az alábbi elegáns formát ölti:

$$\begin{aligned}
H_{\text{int}}(12) &= \alpha \cdot n_1 n_2 + \beta \cdot \tau_1^z \tau_2^z + \gamma \cdot (\tau_1^+ \tau_2^- + \text{h.c.}) + \\
&\quad \tilde{\alpha} \cdot X_{12}^S + \tilde{\beta} \cdot X_{12}^S \tau_1^z \tau_2^z + \tilde{\gamma} \cdot X_{12}^S (\tau_1^+ \tau_2^- + \text{h.c.}),
\end{aligned} \tag{50}$$

ahol

$$\begin{aligned}
\alpha &= \frac{1}{4} (E_{S=1}^{++} + E_{S=0}^{++}) + \frac{1}{8} (E_{S=1}^{(S)} + E_{S=0}^{(S)} + E_{S=1}^{(A)} + E_{S=0}^{(A)}) \\
\beta &= E_{S=0}^{++} + E_{S=1}^{++} - \frac{1}{2} (E_{S=0}^{(S)} + E_{S=1}^{(S)} + E_{S=0}^{(A)} + E_{S=1}^{(A)}) \\
\gamma &= \frac{1}{4} (E_{S=0}^{(S)} + E_{S=1}^{(S)} - E_{S=0}^{(A)} - E_{S=1}^{(A)}) \\
\tilde{\alpha} &= \frac{1}{4} (E_{S=1}^{++} - E_{S=0}^{++}) + \frac{1}{8} (E_{S=1}^{(S)} - E_{S=0}^{(S)} + E_{S=1}^{(A)} - E_{S=0}^{(A)}) \\
\tilde{\beta} &= E_{S=1}^{++} - E_{S=0}^{++} + \frac{1}{2} (E_{S=0}^{(S)} - E_{S=1}^{(S)} + E_{S=0}^{(A)} - E_{S=1}^{(A)}) \\
\tilde{\gamma} &= \frac{1}{4} (E_{S=1}^{(S)} - E_{S=0}^{(S)} + E_{S=0}^{(A)} - E_{S=1}^{(A)}).
\end{aligned}$$

Látható, hogy az (50) Hamilton-operátor SU(2) szimmetriával rendelkezik a spinszektorban, viszont az izospinszektorban a γ -s tag miatt csak $\mathbb{Z}_2$ szimmetriával bír. Azonban, mint azt látni fogjuk, u_{2q} nagyságrendekkel kisebb u_0 -nál a teljes Wigner-kristály fázisban, ezért nyugodtan elhanyagolhatjuk, vagyis mind a négy altér ugyanazzal az effektív Hamilton-operátorral írható le! Ennek viszont komoly következményei vannak: látni fogjuk, hogy jó közelítéssel a négy altérben az első gerjesztési energia megegyezik:

$$E_{S=1}^{++} - E_{S=0}^{++} \approx E_{S=1}^{(S)} - E_{S=0}^{(S)} \approx E_{S=0}^{(A)} - E_{S=1}^{(A)} \equiv \Delta > 0 \quad (51)$$

Ezzel a spinkicserélődést tartalmazó tagok jelentősen leegyszerűsödnek:

$$\frac{\Delta}{4} \cdot X_{12}^S + \Delta \cdot X_{12}^S \tau_1^z \tau_2^z + \frac{\Delta}{2} \cdot X_{12}^S (\tau_1^+ \tau_2^- + \text{h.c.}) = \frac{\Delta}{2} \cdot X_{12}^S \left(2\boldsymbol{\tau}_1 \boldsymbol{\tau}_2 + \frac{1}{2} \right) = \frac{\Delta}{2} \cdot X_{12}^S X_{12}^\tau \quad (52)$$

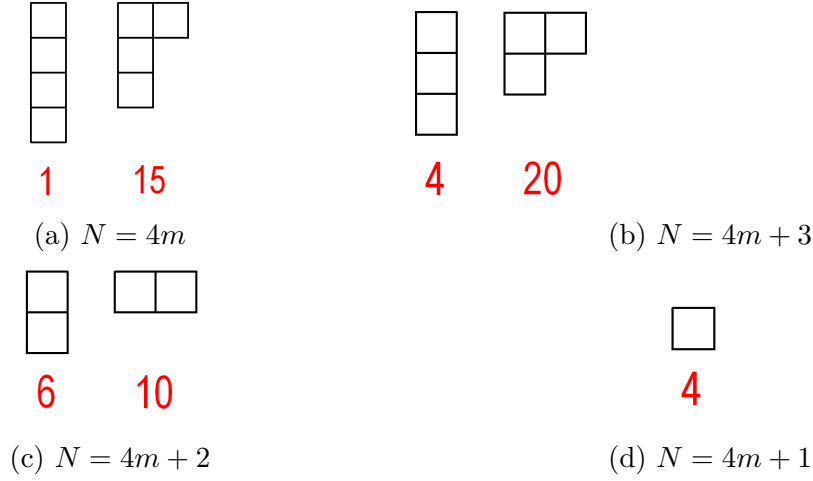
Mivel az egyes alterekben ugyanaz az alapállapot energiája, ezért $\beta = \gamma = 0$. A $++$, $--$, (S) és (A) alterek mind degeneráltak (44) alapján, így az alapállapot összesen 6-szorosan, míg az első gerjesztett állapot összesen 10-szeresen degenerált. Ezzel az eredetileg összetettnek látszó kicserélődésre a következőt kapjuk:

$$H_{\text{int}}(ij) = \alpha \cdot n_i n_j + \frac{\Delta}{2} \left(2\mathbf{S}_i \mathbf{S}_j + \frac{1}{2} \right) \left(2\boldsymbol{\tau}_i \boldsymbol{\tau}_j + \frac{1}{2} \right) = \alpha \cdot n_i n_j + \frac{\Delta}{2} X_{ij}^S X_{ij}^\tau \quad (53)$$

Azonnal le tudjuk olvasni, az SU(2) $\times$ SU(2) szimmetriát, sőt, mivel a spint és izospint egyszerre forgatja, SU(4) szimmetriával is bír. A teljes (26) Hamilton-operátorban pedig a lokalizáltság miatt elég a szomszédos elektronok kicserélődési kölcsönhatásával számolnunk. Az előbbieket szerint tehát a következőt kaptuk:

$$\mathcal{H} = \sum_{\substack{\langle i,j \rangle \\ i < j}} H_{\text{int}}(ij) = \sum_{\substack{\langle i,j \rangle \\ i < j}} \left[\frac{\Delta}{2} X_{ij}^S X_{ij}^\tau + \alpha \cdot n_i n_j \right]. \quad (54)$$

Nagyon meglepő eredményre jutottunk tehát: a Wigner-kristály fázis nagy pontossággal leírható egy SU(4)-szimmetrikus modellel. Hasonló modelleket használtak már mások is, például átmeneti- és ritkaföldfémekből álló vegyületek leírására [12].



8. ábra. Az $SU(4)$ irreducibilis reprezentációit szemléltető Young-tablók. A számok a reprezentációk dimenzióját, azaz a megfelelő multipliett degenerációfokát jelölik

Multipliett-szerkezet. Most megvizsgáljuk a teljes kristályt leíró (54) Hamilton-operátor alap- és gerjesztett állapotait. Kényelmesen a Young-tablók nyelvén tudunk dolgozni [10]. Ha N elektronunk van a Wigner-kristályban, minden N dobozból álló standard Young-tabló megfelel egy multipliettnak. Egy adott multipliett degenerációfokát az határozza meg, hogy hány, a multipliettnak megfelelő szimmetriájú N részecskés hullámfüggvény képezhető a négy adott egyrészecske állapotunkból, azaz, hogy a multipliettet szimbolizáló tablónak hányféle szabályos kitöltése létezik az 1, 2, 3, 4 számok felhasználásával. Mivel minden kitöltött tabló egy olyan N részecskés hullámfüggvényt ír le, melyben az oszlopokban szereplő egyrészecske-hullámfüggvények szerint antiszimetrizálunk, ezért két multipliett közül annak lesz az alacsonyabb az energiája, melyben az oszlopok összmagassága nagyobb. Mivel négyféle egyrészecske állapotunk van, ezért a Young-tablókban eleve nem lehet négynél magasabb oszlop, a pont négy magas oszlopokat pedig elhagyhatjuk, lévén egyértelmű a kitöltésük. Nagyobb N -ekre az összes tabló felsorolása reménytelen feladat, de az első néhány nívót könnyen meg tudjuk határozni.

Ha $N = 4m$, akkor az alapállapotot az m darab négy magasságú oszlop jelképezi, ami egy $SU(4)$ szingulett. A második nívó $m - 1$ darab négy magasságú, egy három és egy egy magasságú oszlopból áll, lásd a 8. ábrát. Ha $N = 4m + 2$, akkor alapállapot hat- illetve az első gerjesztett állapot tízszeresen degenerált, ahogy azt már az előbb láttuk a kétrészecske probléma tárgyalásakor. Amennyiben $N = 4m + 3$, az alapállapot négyszeresen, az első gerjesztett állapot hússzorosan, míg $N = 4m + 1$ esetén az alapállapot négyszeresen degenerált. A magasabb nívók degenerációfoka is meghatározható, de sorrendjük eldöntése bonyolultabb feladat.

	Spin beállítás	Izospin beállítás	Összenergia
1.	FM	FM	$\frac{\Delta}{2} - 2\mu_B B - 2\mu_{\text{orb}} B$
2.	FM	AFM	$-\frac{\Delta}{2} - 2\mu_B B$
3.	AFM	FM	$-\frac{\Delta}{2} - 2\mu_{\text{orb}} B$

1. táblázat. Két szomszédos elektron összenergiája, B nagyságú tengelyirányú mágneses térben. FM paralell, AFM antiparalell beállást jelöl

Viselkedés mágneses térben. Két rácspontot tekintve és a spineket klasszikus spinekként kezelve kvalitatíven megérthetjük a modell mágneses térben való viselkedését. A pontos viselkedés kiderítéséhez a Hamilton-operátor numerikus diagonalizására lenne szükség. Mágneses tér hiányában két szomszédos elektron összenergiája kétféle értéket vehet fel annak függvényében, hogy a spinjeik és izospinjeik hogyan rendeződnek, lásd (53). Ha mindkét szektor paralell módon áll be, akkor az energia $\frac{\Delta}{2}$. Ha a két spin antiparalell (AFM), de az izospin paralell, vagy fordítva, akkor az összenergia $-\frac{\Delta}{2}$. Ha tengelyirányú B mágneses teret kapcsolunk be, akkor versengés indul meg ezen antiferromágneses rendre való törekvés és a spin illetve izospin Zeeman-tagok között: a mágneses tér polarizálná a spineket és izospineket, de a köztük fellépő kicserélődési kölcsönhatás egymással ellentétes irányba rendezné őket. Az egyes energiákat az 1. táblázat tartalmazza.

Mivel $\mu_{\text{orb}} > \mu_B$, ezért a 3. lehetőség energetikailag mindig kedvezőbb a 2.-nál. Láttuk azonban, hogy Δ igen érzékenyen függ az elektronsűrűségtől, így az 1. és 3. lehetőség viszonya változhat! Amíg

$$\begin{aligned} \frac{\Delta}{2} - 2\mu_B B - 2\mu_{\text{orb}} B &< -\frac{\Delta}{2} - 2\mu_{\text{orb}} B \Leftrightarrow \\ \frac{\Delta}{2} &< \mu_B B, \end{aligned} \tag{55}$$

addig a részecskék spinjét és izospinjét is képes polarizálni a mágneses tér. Ez „alacsony” elektronsűrűségeknel fordul elő. Ha azonban növeljük az elektronsűrűséget, akkor az egyenlőtlenség iránya megfordul és antiferromágneses spinrendeződés várható. Ezt ténylegesen sikerült kísérletileg kimutatni [4].

Az atomi hullámfüggvények elhagyásáról. Mint azt a 2.3 alfejezt végén kiemeltük, a $\mathbf{Q}$ és $\mathbf{Q}'$ pontokhoz tartozó atomi u_ν hullámfüggvény megegyezik, így a kétrészecske-hullámfüggvény elkészítésekor az elhagyott tényező:

$$|u_\nu(y_1, \varphi_1)|^2 \cdot |u_\nu(y_2, \varphi_2)|^2. \tag{56}$$

Ebben a függvényben minden rácsponton lévő p-pályának azonos az amplitudója. Ez a függvény megjelenik az izospin-megmaradást kifejező (41) integrálban, valamint u_0 és u_{2q} esetében is, lásd a (42) és (43) egyenleteket. Nem nehéz meggondolni, hogy az izospin-megmaradás most is teljesül. Az u_0 függvény esetében is, mivel

$$\frac{1}{\sqrt{y^2 + R^2 + 2R^2(1 - \cos \varphi)}} \quad (57)$$

atomi skálán lassan változik, ezért az (56) függvény elhagyható. Más a helyzet u_{2q} esetében, hiszen a benne szereplő $\cos(2QR\varphi)$ atomi szinten is gyorsan oszcillál, így u_ν elhagyása nem teljesen indokolt. Az eddig alkalmazott közelítés azonban nagyságrendileg helyes becslést ad, ugyanis az atomi rácsnak az oszcillációja körülbelül $\cos(n\varphi)$, ami jelentősen eltér $\cos(2QR\varphi) \approx \cos(4n\varphi/3)$ -tól, így u_{2q} továbbra is elhanyagolható marad u_0 mellett.

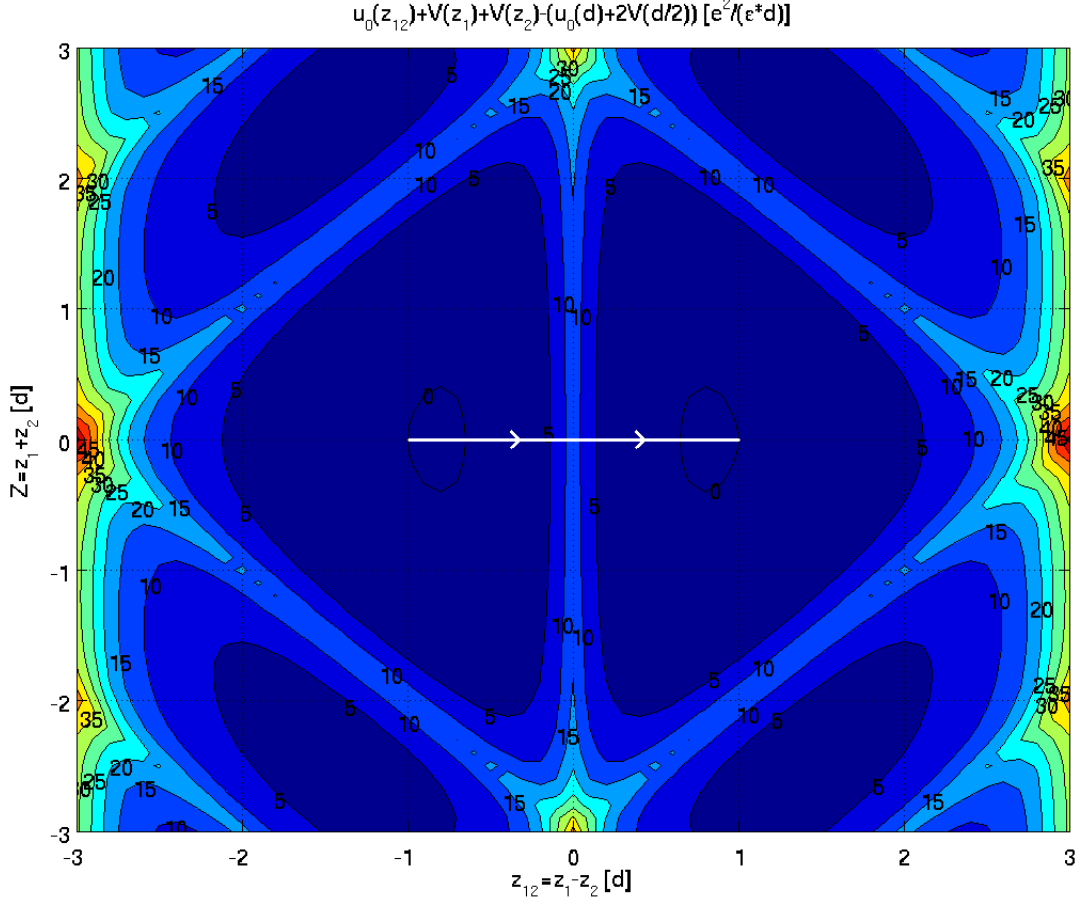
3.3. A kicserélődés szemiklasszikus számítása

Ebben az alfejezetben meghatározzuk az (54) egyenletben megjelenő Δ kicserélődési kölcsönhatást. Ahogy a 3.2 alfejezetben láttuk, a kételektron probléma megoldásán keresztül megkaphatjuk a Wigner-kristályt alkotó elektronok közötti effektív kicserélődési kölcsönhatást. Elvileg eljárhatnánk úgy is, hogy numerikusan diagonalizáljuk a négy spin-izospin altérben meghatározott effektív Hamilton-operátorokat, azonban sokkal elegánsabb módon is célhoz érhetünk [11]. A két szabad elektron teljes kölcsönhatási energiája:

$$U_{tot}(Z, y_{12}) = u(y_{12}) + V(y_1) + V(y_2) = u(y_{12}) + V\left(\frac{Z + y_{12}}{2}\right) + V\left(\frac{Z - y_{12}}{2}\right), \quad (58)$$

ahol $y_{12} = y_1 - y_2$, $Z = y_1 + y_2$. Itt már elhagytuk u_{2q} -t, hiszen sok nagyságrenddel kisebb, mint u_0 . A potenciál alakját a 9. ábra mutatja. Két minimuma van: $y_{12} = \pm d$, $Z = 0$, ami megfelel annak, hogy a két részecske épp az egyensúlyi helyén tartózkodik ($\pm d/2$). Miután a kétrészecske hullámfüggvény spin- illetve izospin szimmetriája meghatározza, hogy a térbeli hullámfüggvény szimmetrikus (alapállapot) vagy antiszimmetrikus (gerjesztett állapot), így a kicserélődési kölcsönhatás azonosítható a kétfenekű potenciálban mozgó részecske mozgásával. Ha a potenciállal végtelen magas lenne, az alagutazás lehetetlen, a rendszer degenerált aszerint, hogy az egyik vagy másik gödörben van a részecske. Azonban ha az alagutazás lehetséges, a nívók felhasadnak. Az alábbi kétfenekű potenciálban az alagutazásnak megfelelő nyeregponthoz tartozó út vonal, melynek minimális a hatása, a $(y_{12} = \pm d, Z = 0)$ pontokat összekötő egyenes szakasz. Így kváziklasszikus közelítésben a felhasadás:

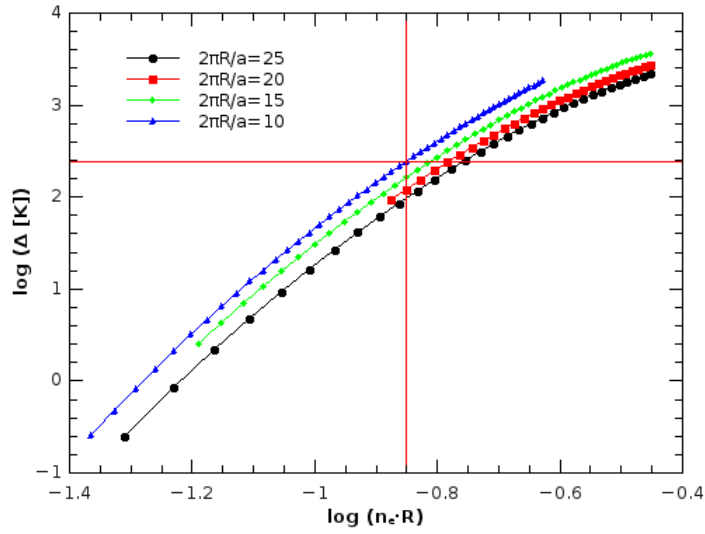
$$\Delta = \frac{\hbar\omega}{\pi} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{-A}^A dy \sqrt{2m \left(U_{tot}(0, y) - \frac{\hbar\omega}{2} \right)}\right) \quad (59)$$



9. ábra. $U_{tot} [e^2/(\epsilon d)]$. A fehér nyíl az alagutazás irányát mutatja

ahol $m = m^*/2$, hiszen tömegközépponti rendszerben vagyunk, $\omega = \sqrt{U''_{tot}(0, d)/m}$ pedig a gödör alján történő rezgések frekvenciája, A pedig a klasszikus mozgás fordulópontja, azaz $U_{tot}(0, A) = \hbar\omega/2$. Ha a gödör aljánál parabolával közelítjük a potenciált, akkor $A = d - \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ adódik.

Látható, hogy a képletből nem lehet kiskálázni d -t, mivel két független hosszskála is van a rendszerben (d és R), ezért csak numerikus számításokra hagyatkozhatunk. Az eredményeket a 10. ábrán láthatjuk. Kísérletileg akkor tudjuk megfigyelni a dolgozatban levezetett kicserélődési kölcsönhatásokat, ha az elektronsűrűséget úgy állítjuk be, hogy Δ elég nagy legyen ahhoz, hogy a termikus fluktuációk ne mossák el a hatását. Látható, hogy viszonylag szűk tartományon lehet olyan Wigner-kristályunk, amelyben ez teljesül.



10. ábra. A felhasadás nagysága többféle átmérőjű nanocső esetén. A piros vonal a modell (37) érvényességi határát jelöli.

4. Összefoglalás, kitekintés

A dolgozatban félvezető szén nanocsövekben alacsony hőmérsékleten létrejött Wigner-kristály modellezésével foglalkoztunk. A szükséges elméleti alapok vázolása után részletesen ismertettünk egy modellt, amelyben figyelembe vesszük, hogy az elektronok a nanocső-geometria következtében izospin szabadsági fokkal is rendelkeznek a szokásos spin mellett.

A Wigner-kristály elektronjainak hullámfüggvényét a nanocső atomi hullámfüggvényeiből képzett hullámcsomagokkal közelítjük. Hartree-közelítésben meghatároztuk az elektronokra ható effektív potenciált. Ennek segítségével kiszámoltuk, hogy milyen elektronsűrűségekre várunk Wigner-kristályt a nanocsőben. A kicserélődési kölcsönhatás meghatározásához először egy kétrészecske problémát vizsgáltunk. Meghatároztuk a lehetséges spin- és izospin állapotokat. Az egyes nívók közti Δ felhasadásnak a sűrűségtől való függését szemiklasszikus közelítésben számoltuk ki. Meglepő eredményre jutottunk: a nanocsőben kialakult Wigner-kristály nagy pontossággal leírható egy egydimenziós, $SU(4)$ szimmetrikus modellel. Young-tablók segítségével meghatároztuk az alacsony-energiás szektor első néhány multipllettjének szerkezetét és degenerációfokát. Kvalitatíven vázoltuk a modell mágneses térben való viselkedését, melyet kísérletileg is igazoltak.

A témában nagyon sok vizsgálnivaló van még. Hátravan az effektív modell spektrumának numerikus vizsgálata, valamint a spin és az izospin szabadsági fokok kollektív töltésfluktuációkhoz való csatolásának vizsgálata is. A spin és töltés szabadsági fokok

ugyanis alapvetően eltérően viselkednek a híg limeszben: a spin kicserélődés az elektronsűrűséggel exponenciálisan tűnik el, a töltésgerjesztések energiája viszont algebrailag. Így kialakul egy spin inkohereus tartomány, ahol a spingerjesztések jóval lassabban terjednek, mint a töltésgerjesztések. A lokalizált spingerjesztések visszacsatolódnak a töltésgerjesztésekhez, és inkohereciát okoznak.

5. Köszönetnyilvánítás

Szeretnék őszinte köszönetet mondani témavezetőimnek, Dr. Szirmai Edinának és Prof. Zaránd Gergelynek a témába való bevezetésért, és mindazért a segítségért és támogatásért, melyet a mindennapi munka és e dolgozat írása során nyújtottak, kezdve a legapróbb stilisztikai javításoktól a koncepcionális meglátásokig.

A. Függelék: u_{2q} kiszámítása

Az u_{2q} függvény számolásánál különösen vigyázni kell, mert a benne szereplő $\cos(2QR\varphi)$ gyorsan oszcillál:

$$2QR = 2(K_x + \frac{\nu}{3R}) \cdot R = 2 \left(\frac{4\pi}{3a} \cdot \frac{na}{2\pi} + \frac{\nu}{3} \right) = 2(2k + \nu). \quad (60)$$

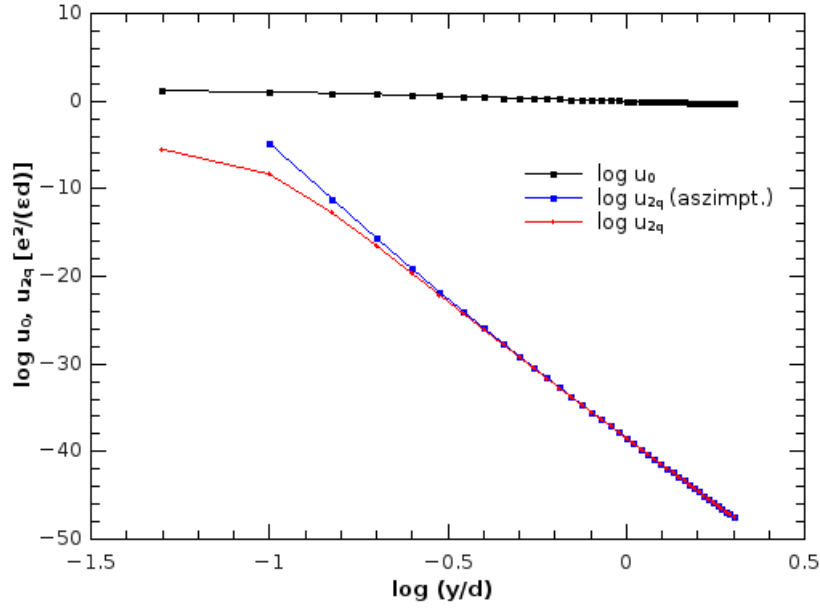
Emiatt a nagyságrendekkel kisebb értéket várunk, mint u_0 -nál. Hogy ezt lássuk, nézzük előbb az aszimptotikus viselkedését:

$$\begin{aligned} u_{2q}(y) &= \frac{e^2}{\epsilon} \int \frac{d\varphi}{2\pi} \frac{\cos 2(2k + \nu)\varphi}{\sqrt{y^2 + R^2 + 2R^2(1 - \cos \varphi)}} \Big|_{y \gg R} \\ &= \frac{e^2}{\epsilon} \frac{1}{\sqrt{y^2 + R^2}} \sum_{l=0}^{\infty} \binom{-1/2}{l} \left(\frac{2R^2}{y^2 + R^2} \right)^l \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} \cos [2(2k + \nu)\varphi] (1 - \cos \varphi)^l. \end{aligned} \quad (61)$$

Mivel $l = 2(2k + \nu)$ a legkisebb l , amire az integrál zérustól különböző, ezért u_{2q} aszimptotikusan igen gyorsan, $1/|z|^{2(2k+\nu)+1}$ szerint cseng le:

$$u_{2q}(y \gg R) = \frac{e^2}{\epsilon} \binom{4(2k + \nu)}{2(2k + \nu)} \cdot \left(\frac{R}{2} \right)^{4(2k+\nu)} \frac{1}{|y|^{4(2k+\nu)+1}}. \quad (62)$$

Numerikusan elég nehéz a számlálóban szereplő koszinusszal ebben a formában elbánni, ezért kifejtjük $\cos \varphi$ polinomjaként:



11. ábra. u_0 és u_{2q} , kék színnel a számolt aszimptotikus viselkedés, lásd (62) ($d/R = 23, 2$, $2\pi R/a = 10$)

$$\cos 2(2k + \nu)\varphi = T_{2(2k+\nu)}(\cos \varphi) = \sum_j c_j \cdot \cos^j \varphi, \quad (63)$$

ahol $T_{2(2k+\nu)}$ a $2(2k + \nu)$ -edik Csebisev-polinom. Ezzel eltüntettük a gyorsan oszcilláló tényezőt, és jól számolható integrálokhoz jutottunk:

$$u_{2q}(z) = \frac{e^2}{\epsilon} \cdot \sum_{j=0}^{2(2k+\nu)} c_j \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} \frac{\cos^j \varphi}{\sqrt{z^2 + R^2 + 2R^2(1 - \cos \varphi)}}. \quad (64)$$

A 11. ábrán látható az u_{2q} függvény. A nagyságrendek áttekinthetősége érdekében u_0 -t is ábrázoltuk. Szépen látszik az előbb számolt aszimptotikus viselkedés. valamint az is, hogy u_{2q} még nagy elektronsűrűségek ($y \sim d \sim R$) esetén is legalább hat nagyságrenddel kisebb u_0 -nál, azaz a modell (37) érvényességi határán belül valóban jogosan hanyagoltuk el.

Hivatkozások

- [1] T. Giamarchi, Quantum Physics in One Dimension, Oxford University Press (2003)
- [2] R. Saito, G. Dresselhaus, M.S. Dresselhaus, Physical properties of carbon nanotubes, Imperial College Press (1998)

- [3] E. Wigner, On the Interaction of Electrons in Metals, *Phys. Rev.* **46**, 1002–1011 (1934)
- [4] V.V. Deshpande, M. Bockrath, The one-dimensional Wigner crystal in carbon nanotubes, *Nature Physics* **4**, 314 (2008)
- [5] V.V. Deshpande, M. Bockrath, L.I. Glazman, A. Yacoby, Electron liquids and solids in one dimension, *Nature* **464**, 209 (2010)
- [6] A. Secchi, M. Rontani, Wigner molecules in carbon-nanotube quantum dots, *Phys. Rev. B* **82**, 035417 (2010)
- [7] T. Ando, Theory of Electronic States and Transport in Carbon Nanotubes, *J. Phys. Jpn.* **74** pp. 777-817 (2005)
- [8] H.J. Schultz, Wigner Crystal in One Dimension, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 1864 (1993)
- [9] R. Egger, W. Häusler, C.H. Mak, H. Grabert, Crossover from Fermi liquid to Wigner molecule behavior in quantum dots, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 3320-3323 (1999)
- [10] W. Greiner, B. Müller, *Quantum Mechanics – Symmetries*, Springer-Verlag (1989)
- [11] W. Häusler, Correlations in Quantum Dots, *Z. Phys. B.* **99**, 551 (1996)
- [12] Y. Yamashita, N. Shibata, K. Ueda, SU(4) spin-orbit critical state in one dimension, *Phys. Rev. B* **58**, 9114 (1998)