

Kohlenstoff-Nanoröhrchen

Fermi-Flüssigkeiten und Bosonisierung

Bernhard Wurm

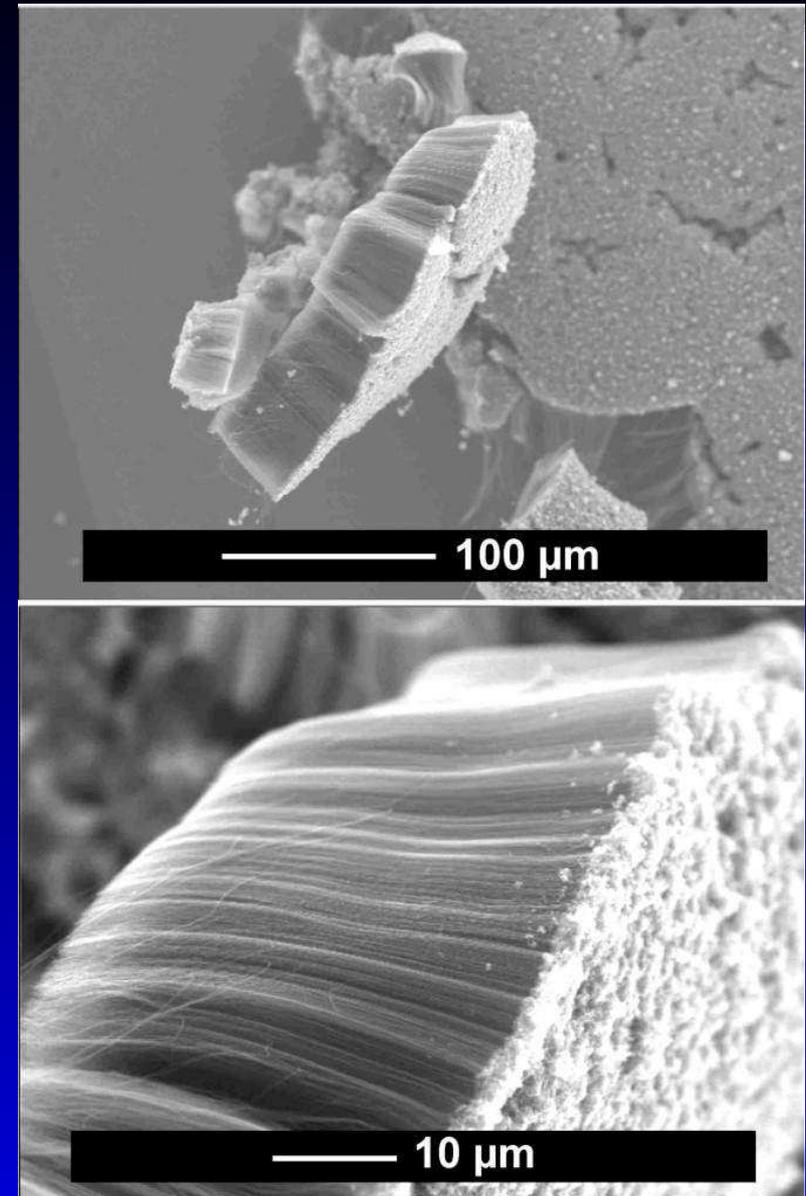
wurm.@web.de

Gliederung

- Kohlenstoff-Nanoröhrchen
- Greensfunktions-Formalismus
- Fermi-Flüssigkeit
- Bosonisierung

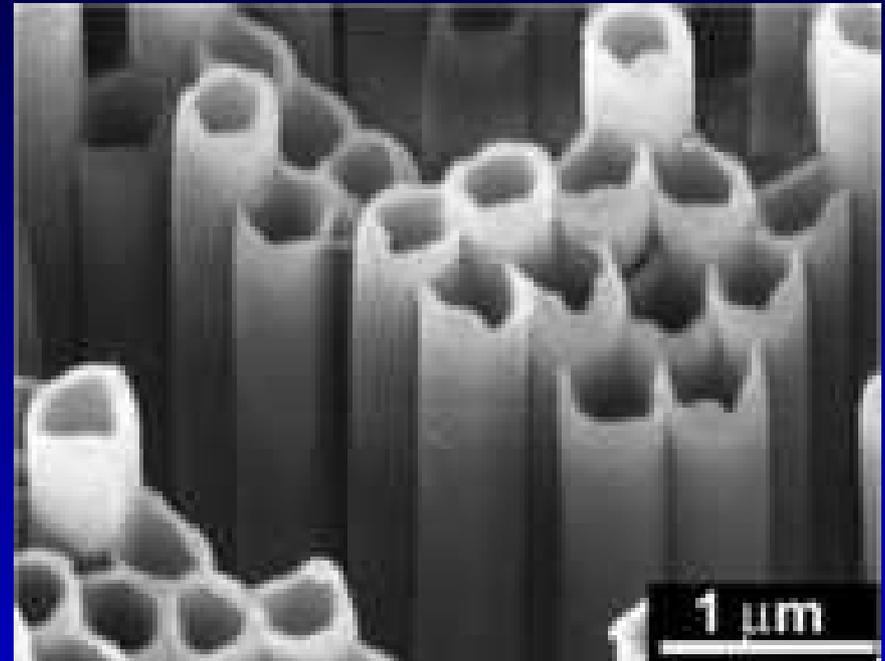
Kennndaten

- wurden 1991 von Sumio Iijima entdeckt
- CNT sind Hohlzylinder aus Kohlenstoff
- Durchmesser: 1-50nm
- Länge: 1-1000 μm
- Man unterscheidet: SWNT und MWNT



Eigenschaften

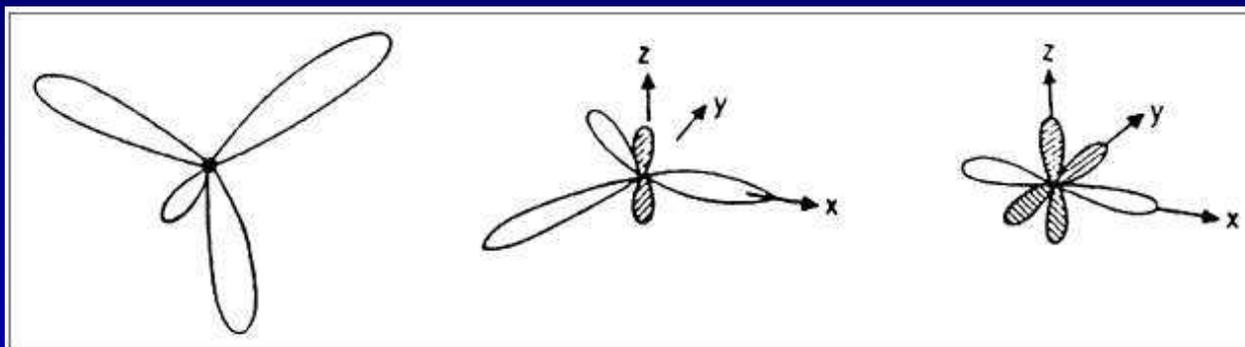
- hohe Strombelastbarkeit
- überragende Zugfestigkeit
- große Elastizität
- halbleitend oder metallisch



Allotrope des Kohlenstoffs

Kohlenstoff ist äußerst vielseitig, der Grund ist das es selbst in elementarer Form in drei verschiedenen Allotropen existiert.

Kann sp^1 , sp^2 und sp^3 hybridisierte Bindungen eingehen.



sp^3

sp^2

sp^1

Bild 3.1 Schematische Darstellung der sp^3 , sp^2 und sp^1 Hybridisierungen des Kohlenstoffs. Die schraffierten Orbitale entsprechen schwachen Bindungen, die ungeschraffierten entsprechen starken Bindungen (Bild nach S. Praver und C. J. Rossouw [PRA88]).

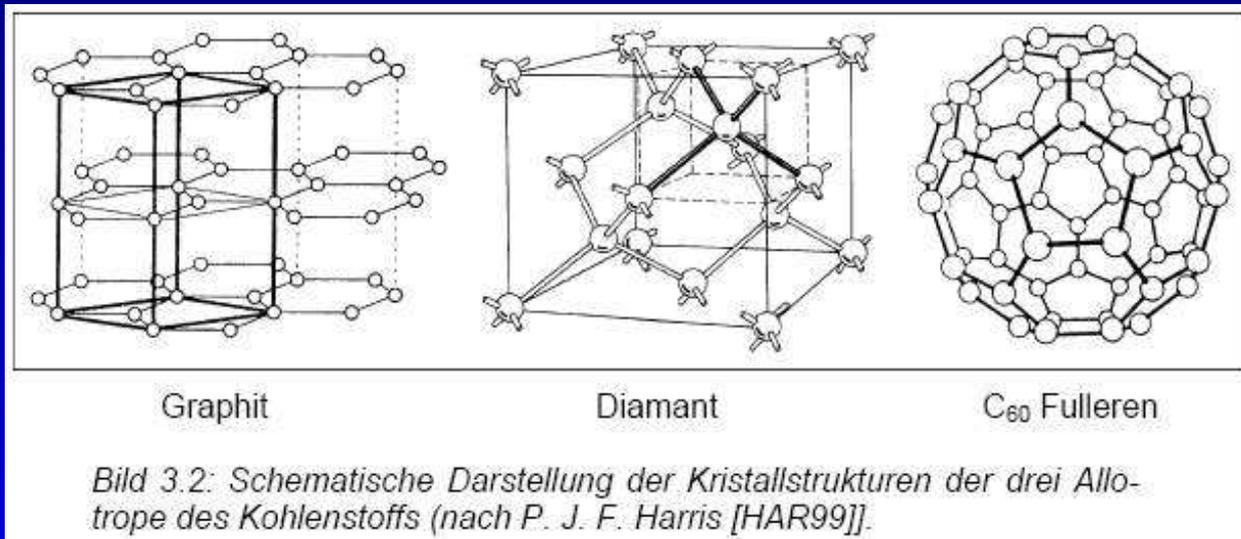
Resultierende Strukturen

$sp^1 \Rightarrow$ organische Verbindungen

$sp^2 \Rightarrow$ Graphit

$sp^3 \Rightarrow$ Diamant

Fullerene entstehen durch Einfügen von 5-Ecken in zweidimensionale hexagonale Graphitstruktur, wodurch diese eine positive Krümmung erfährt.



Struktur

CNT: Mischstrukturen aus Graphit und Fullerenen.

Vorstellung: zu einem Zylinder zusammengefügte Graphitebene, dessen Enden durch halbaufgeschnittene Fullerene geschlossen sind.

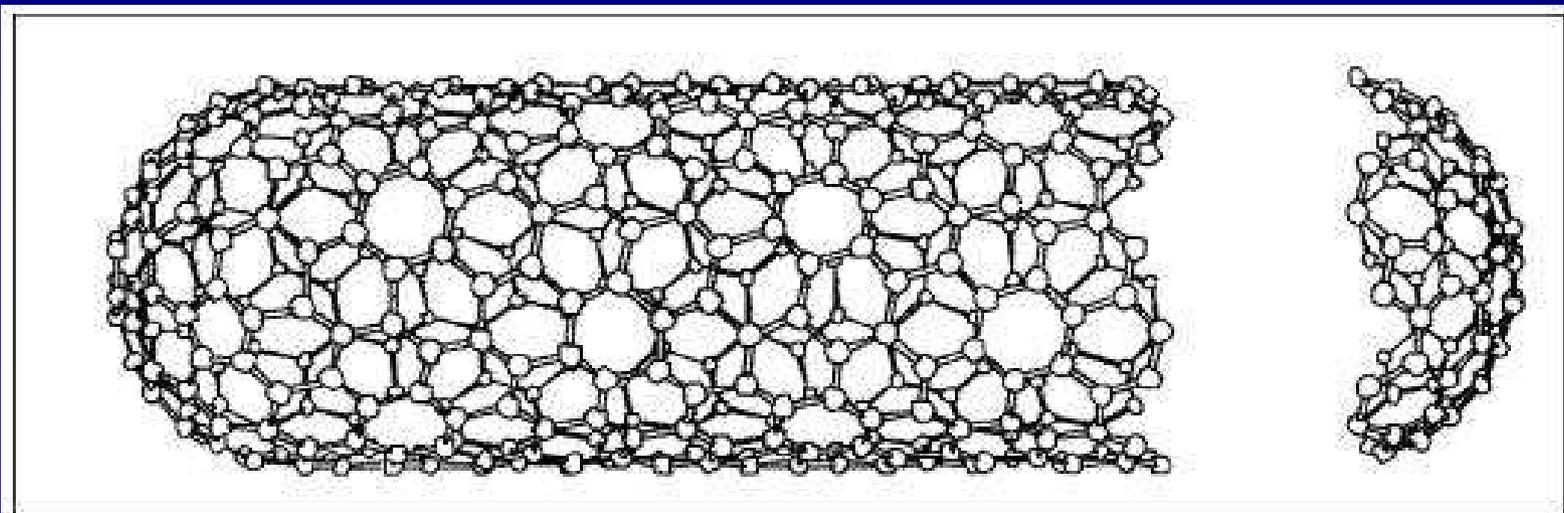


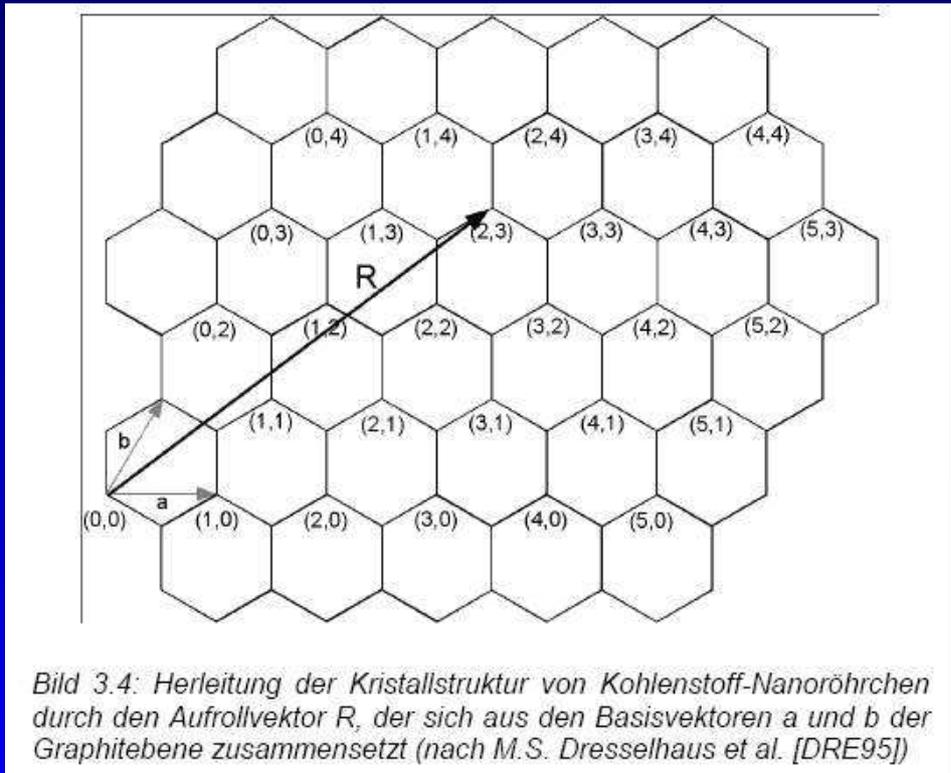
Bild 3.3: Modell eines offenen chiralen CNTs mit einer getrennt dargestellten Endkappe (Bild nach M.S. Dresselhaus et al. [DRE95]).

Kristallstruktur

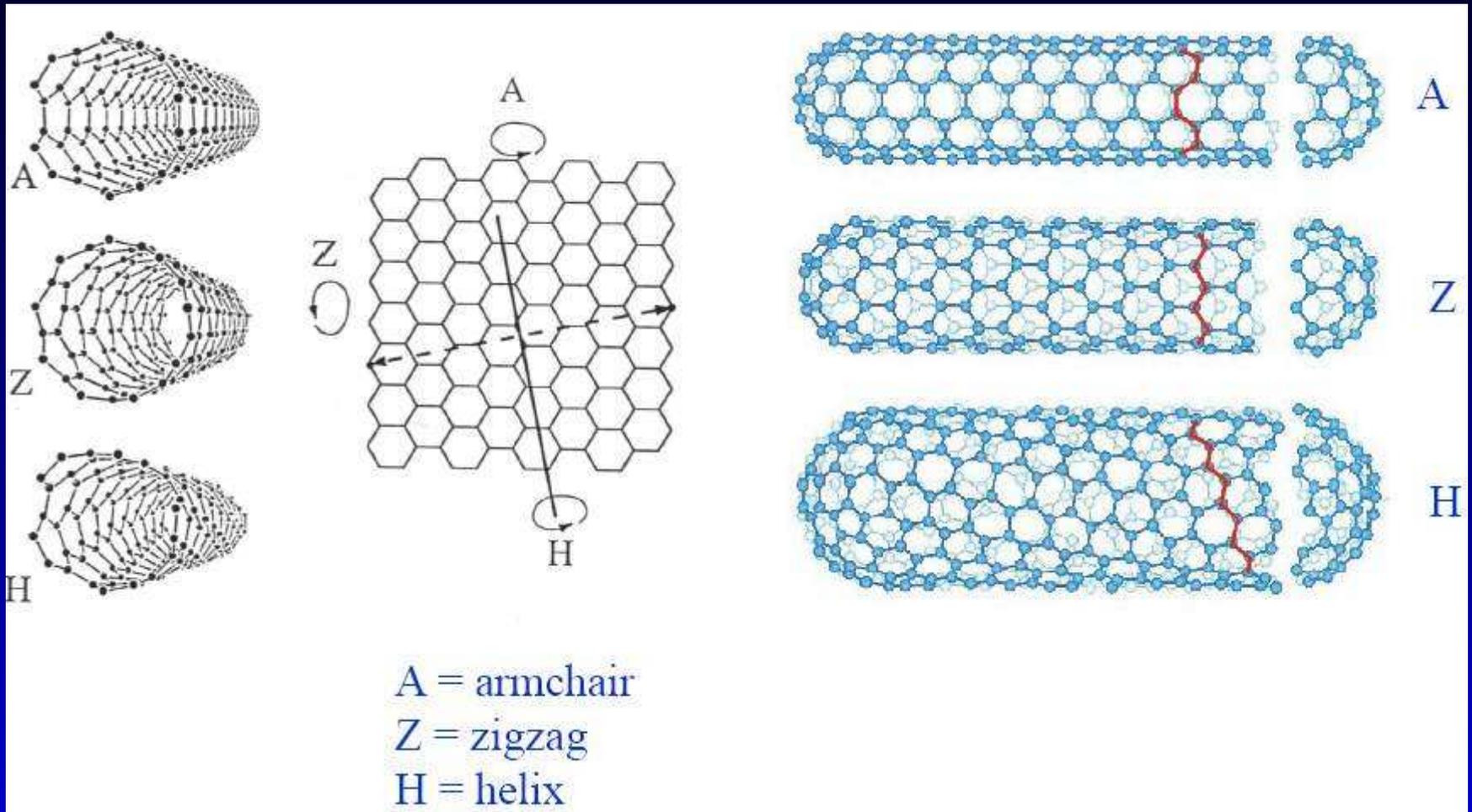
Definition: $R=ma+nb$ Aufrollvektor

Bildlich: $|R|$ =Umfang des CNT; θ bildet Winkel zwischen Richtung der Röhrenachse relativ zum Graphitgitter.

- $m=n$ „armchair“
- $m=0$ zig-zag
- sonst chiral
- metallisch, falls $m - n = 3 \cdot l, l \in \mathbb{Z}$



Strukturdarstellung



Mögliche Anwendungen

- Transistoren
- Flachbildschirme
- zugfeste Werkstoffe
- Nanoelektronik-Bauelemente
- Verstärkungsfasern für Verbundstoffe
- ...

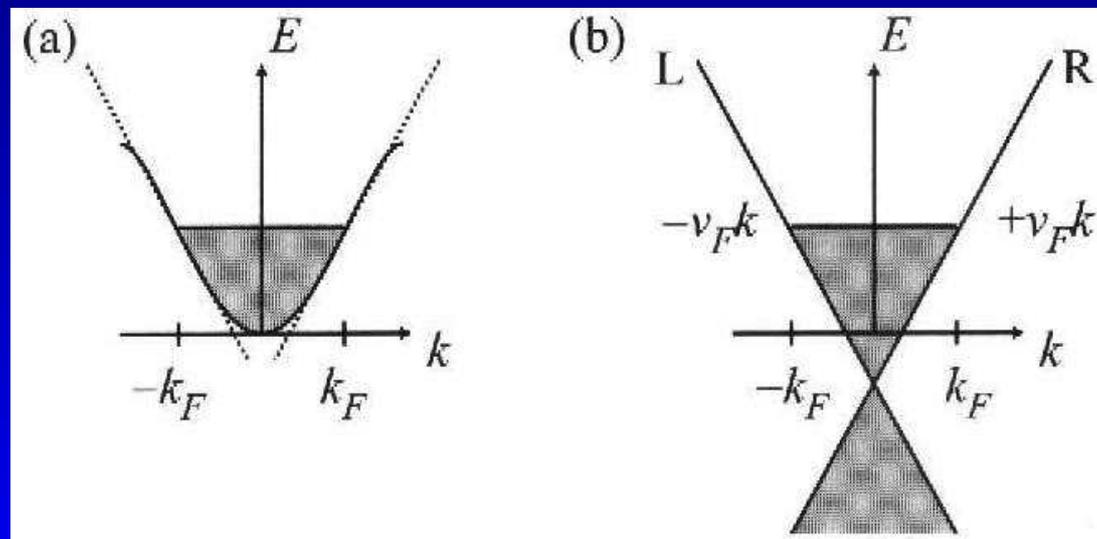


Bosonisierung

Im Folgenden werden wir folgende Voraussetzungen bzw. Vereinfachungen für unser Modell annehmen:

- Spinlose Teilchen
- Sie erfüllen die Fermionrelationen
- Linearisiere die Dispersionsrelation:

$$\epsilon(k) = \epsilon(k_F) + v_F(k - k_F) \text{ mit } v_F = \frac{\hbar v_F}{m}$$



- Energieübertrag q auf alle Impulse erweitern
 - \Rightarrow Erweiterung unseres Spektrums bis $-\infty$ -Zustände
 - \Rightarrow Fermisee durch Diracsee ersetzen
 - \Rightarrow Einführung zweier Arten von Fermionen: rechts und links gehende

Bemerkung: Diese Erweiterung kann zu ∞ führen!

Unter den Annahmen dieses Modells erhalten wir für den freien Hamiltonian:

$$H_0 = \sum_{k,r=R,L} v_F (\epsilon_r k - k_F) c_{r,k}^\dagger c_{r,k}$$

Teilchen-Loch-Anregungen

Energie von einer Teilchen-Loch-Anregung:

$$E_{R,k} = v_F(k + q) - v_F k = v_F q$$

\Rightarrow unabhängig von $k \Rightarrow$ wohldefinierte Anregungen

Idee: Umschreiben des Hamiltonian in die Basis der Teilchen-Loch-Anregungen!

Sinnvoll da:

in 1-d existieren nur kollektive Anregungen \Rightarrow
Dichtefluktuationen sind natürliche Basis, da:

$$\rho(q) = \sum_k c_{k+q}^\dagger c_k$$

sie aus der Superposition von Teilchen-Loch-Anregungen bestehen

Die Teilchen-Loch-Basis

Betrachte eine Zweiteilchenwechselwirkung:

$$H_{int} = \frac{1}{2\Omega} \sum_{k,k',q} V(q) c_{k+q}^\dagger c_{k'-q}^\dagger c'_k c_k$$

$$H_{int} = \frac{1}{2\Omega} \sum_q V(q) \rho(q) \rho^\dagger(q)$$

Dabei wurde benutzt, dass die Zustandsdichte $\rho(x)$ real ist $\Rightarrow \rho^\dagger(q) = \rho(-q)$

Die Teilchen-Loch-Basis

Die *Idee* ist nun, dass ein Produkt von zwei fermionischen Operatoren bosonischer Natur ist.

D.h. $\rho(q) \sim b_q$ oder $\rho(q) \sim b_q^\dagger$ (oder einer Linearkombination)

Damit haben wir einen WW-Hamiltonian erhalten, welcher nur noch quadratisch in den bosonischen Operatoren ist:

$$H_{int} = \frac{1}{2\Omega} \sum_q V(q) \rho(q) \rho(-q) = \frac{1}{2\Omega} \sum_q (\dots b_q + \dots b_q^\dagger)^2$$

Diesen können wir im Gegensatz zu dem fermionischen H_{int} , welcher von der vierten Potenz der Operatoren abhängt, diagonalisieren.

Einschub

Definition des Normalgeordneten Produkts:
:ABC: \equiv Normalgeordnetes Produkt

In einem normalgeordneten Produkt werden die Vernichte-Operatoren nach rechts und die Erzeugungs-Operatoren nach links verschoben.

Für zwei Operatoren hält folgende Relation:
: AB := AB - $\langle 0|AB|0 \rangle$

Die Teilchen-Loch-Basis

Durch den Diracsee haben wir unendliche viele Zustände \Rightarrow definieren den Dichte-Operator mit Hilfe eines normal geordneten Produkts:

$$: \rho_r(x) :=: \Psi^\dagger(x) \Psi :$$

$$: \rho^\dagger(p) := \sum_k c_{r,k+p}^\dagger c_{r,k} \quad (p \neq 0)$$

$$: \rho^\dagger(p) := N_r = \sum_k [c_{r,k}^\dagger c_{r,k} - \langle 0 | c_{r,k}^\dagger c_{r,k} | 0 \rangle] \quad (p = 0)$$

Wir berechnen nun die Kommutatorrelationen für die Dichte-Operatoren:

Für zwei unterschiedliche Teilchenarten gilt:

$$[\rho_R^\dagger(p), \rho_L^\dagger(q)] = 0$$

Kommutatorrelationen

$$[\rho^\dagger(p), \rho^\dagger(-q)] = \sum_{k,s} [c_{k+p}^\dagger c_k, c_{s-q}^\dagger c_s]$$

$$= \sum_{k,s} (c_{k+p}^\dagger c_s \delta_{k,s-q} - c_{s-q}^\dagger c_k \delta_{k+p,s})$$

$$= \sum_k (c_{k+p-q}^\dagger c_k - c_{k-q}^\dagger c_{k-p})$$

$$= \sum_k [(: c_{k+p-q}^\dagger c_k : - : c_{k-q}^\dagger c_{k-p} :)]$$

$$+(\langle 0 | c_{k+p-q}^\dagger c_k | 0 \rangle - \langle 0 | c_{k-q}^\dagger c_{k-p} | 0 \rangle)$$

Kommutatorrelationen

$$[\rho^\dagger(p), \rho^\dagger(-q)] = \delta_{p,q} \sum_k (\langle 0 | c_k^\dagger c_k | 0 \rangle - \langle 0 | c_{k-p}^\dagger c_{k-p} | 0 \rangle)$$

$$[\rho^\dagger(p), \rho^\dagger(-q)] = -\delta_{r,r'} \delta_{p,q} \frac{rpL}{2\pi}$$

Damit haben wir gezeigt, dass bis auf einen Faktor, die Dichte-Operatoren die Bosonenrelationen erfüllen!

Es gilt: $\rho_L^\dagger(p > 0) | 0 \rangle = 0$ und $\rho_R^\dagger(p < 0) | 0 \rangle = 0$

Bosonenoperatoren

Definition der bosonischen Vernichtungs- und Erzeugungs-Operatoren:

$$b_p^\dagger = \left(\frac{2\pi}{L|p|} \right)^{1/2} \sum_r \theta(rp) \rho_r^\dagger(p)$$

$$b_p = \left(\frac{2\pi}{L|p|} \right)^{1/2} \sum_r \theta(rp) \rho_r^\dagger(-p)$$

Anm.: Die Operatoren sind nur für $p \neq 0$ definiert.

Dies ist eine vollständige Basis (ohne Beweis).

Umschreiben der Basis

Umschreiben der Fermionoperatoren in die neue Basis.

Berechne Kommutatorrelationen (oBdA $p_0 > 0$):

$$[b_{p_0}, H] = \left(\frac{2\pi}{L|p|} \right)^{1/2} \sum_{r,k} [\rho_R^\dagger(-p_0), v_F(rk - k_F) c_{r,k}^\dagger c_{r,k}]$$

$$= \left(\frac{2\pi}{L|p|} \right)^{1/2} \sum_k v_F p_0 c_{R,k-p_0}^\dagger c_{R,k} = v_F p_0 b_{p_0}$$

Ähnliches erhalten wir für $p_0 < 0$ und $b_{p_0}^\dagger$.

Umschreiben der Basis

Da die bosonischen Operatoren eine vollständige Basis bilden, definieren die Kommutatorrelationen den Hamiltonian:

$$H_0 \simeq \sum_{p \neq 0} v_F |p| b_p^\dagger b_p$$

Damit haben wir erhalten das sowohl H_0 als auch H_{int} quadratisch in den bosonischen Operatoren sind. Damit wird das Lösen des gesamten Hamiltonian relativ einfach!

Umschreiben der Basis

Wenn wir $\Psi_r(x)$ berechnet haben, können wir alle fermionischen Einteilchenoperatoren berechnen.

$$\begin{aligned} [\rho_r^\dagger(p), \Psi_r(x)] &= -e^{ipx} \Psi_r(x) \\ \Rightarrow \Psi_r(x) &\simeq e^{\sum_p e^{ipx} \rho^\dagger(-p) \left(\frac{2\pi r}{pl}\right)} \end{aligned}$$

Problem: Die Resultate für H_0 und $\Psi_r(x)$ können nicht exakt sein, da wir nur einen Operator haben welcher die Teilchenzahl einer Fermionenart um eins erniedrigt und einer der die Teilchenzahl erhält. Um den gesamten Fermion Fock-Raum zu reproduzieren brauchen wir zwei zusätzliche Operatoren (einen für jede Teilchenzahl).

Umschreiben der Basis

Lösung: Einführung von U_r , sodass U_r mit Boson-Operatoren kommutiert und U_r^\dagger erzeugt ein Fermion der Art r .

Damit folgt: $\Psi_r(x) = U_r e^{\sum_p e^{ipx} \rho^\dagger(-p) (\frac{2\pi r}{pl})}$

Jetzt haben wir eine eindeutige Abbildung zwischen dem Fermionraum und dem Bosonraum konstruiert!
Den Hamiltonoperator müssen wir noch um den Beitrag bei $p=0$ erweitern:

$$H_0 = \sum_{p \neq 0} v_F |p| b_p^\dagger b_p + \frac{\pi v_F}{L} \sum_r N_r^2$$

Bosonische Felder

Zudem wird es sich als nützlich erweisen zwei Bosonische Feld einzuführen:

$$\phi(x) = -(N_R + N_L) \frac{\pi x}{L} - \sum_{p \neq 0} \frac{i\pi}{pL} e^{-\alpha|p|/2 - ipx} (\rho_R^\dagger(p) + \rho_L^\dagger(p))$$

$$\theta(x) = (N_R - N_L) \frac{\pi x}{L} + \sum_{p \neq 0} \frac{\pi x}{pL} e^{-\alpha|p|/2 - ipx} (\rho_R^\dagger(p) - \rho_L^\dagger(p))$$

Dabei haben wir einen Abschneideparameter (α) eingeführt, der die oben künstlich eingeführten Unendlichkeiten beseitigt und umgekehrt proportional zur Bandbreite sein soll ($\Lambda \sim 1/\alpha$).

Bosonische Felder

Mit diesen Feldern kann man dann $\Psi_r(x)$ ausdrücken:

$$\Psi_r(x) = U_r \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{2\pi\alpha}} e^{ir(k_F - \frac{\pi}{L})x} e^{-i(r\phi(x) - \theta(x))}$$

Für $L \rightarrow \infty$ gilt:

$$\nabla\phi(x) = -\pi[\rho_R(x) + \rho_L(x)]$$

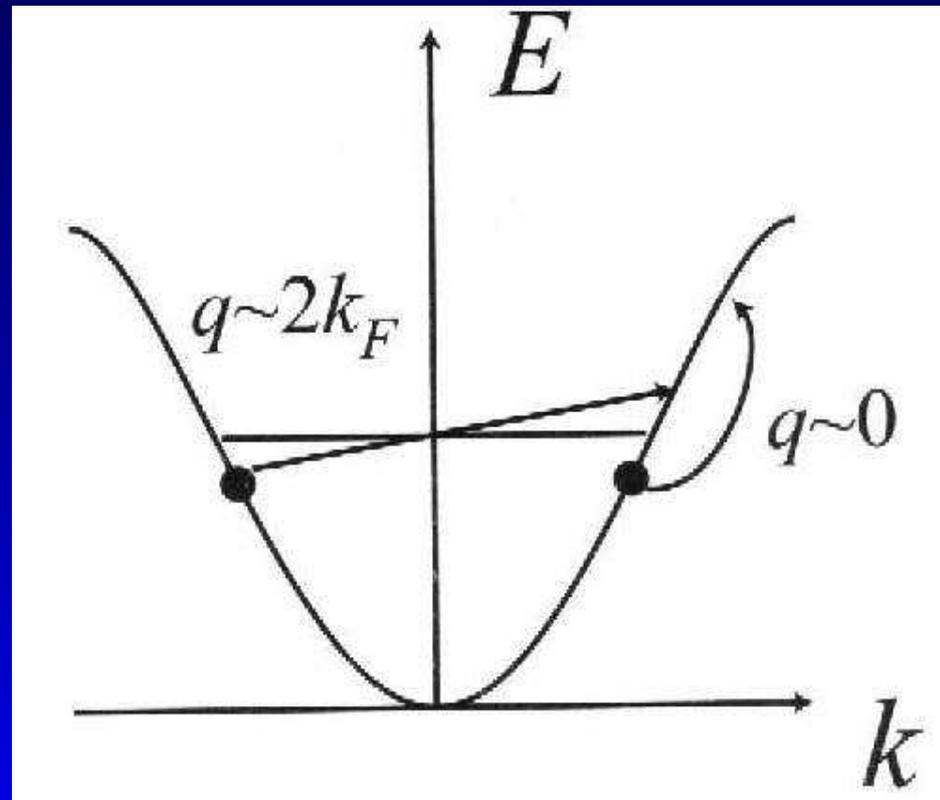
$$\nabla\theta(x) = \pi[\rho_R(x) - \rho_L(x)]$$

Damit lässt sich der Hamiltonian ein letztes mal umschreiben:

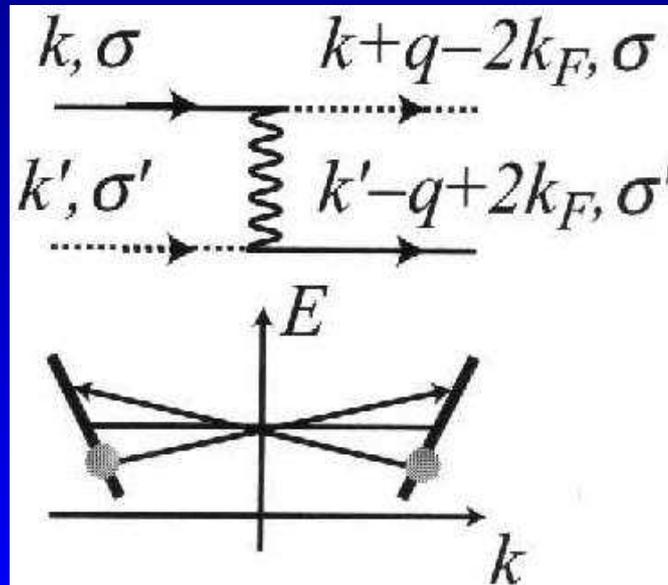
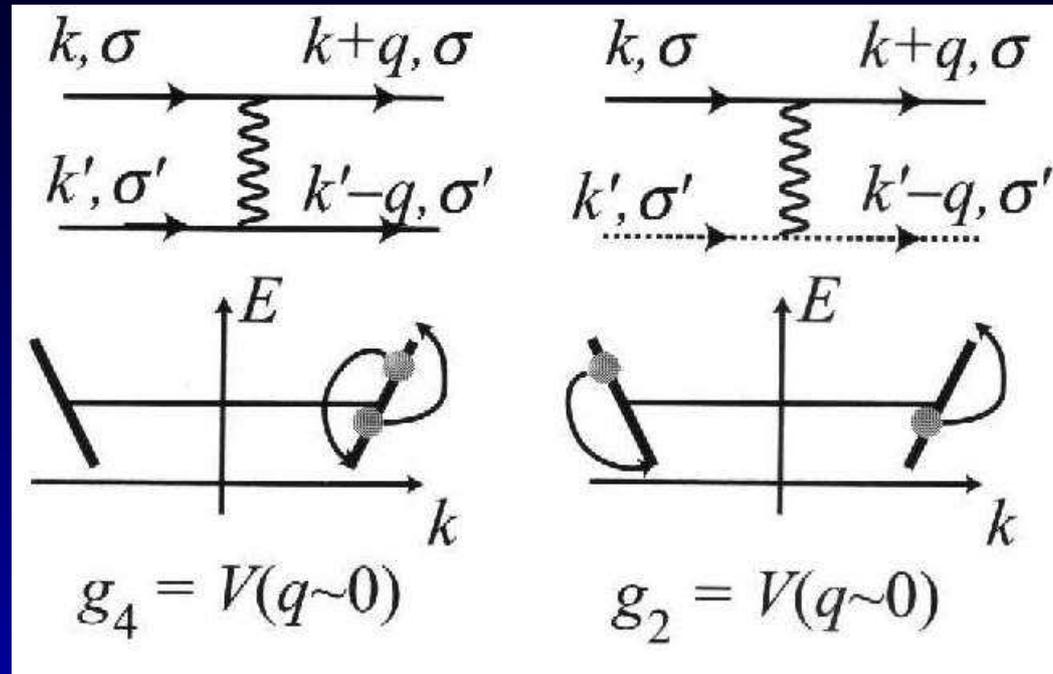
$$H_0 = \frac{1}{2\pi} \int dx v_F [(\nabla\theta(x))^2 + (\nabla\phi(x))^2]$$

WW-Hamiltonian

Wir wollen nun die möglichen WW-Wirkungen in unserem Modell anschauen und anschließend berechnen.



WW-Hamiltonian



WW-Hamiltonian

Spinlose Fermionen \Rightarrow die WW beschrieben durch g_1 und g_2 sind gleich, da man die ausgehenden Teilchen vertauschen kann und sie ununterscheidbar sind.

Bleibt noch g_2 und g_4 zu berechnen:

Dazu betrachten wir den normalen Fermion-Operator:

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_k e^{ikx} c_k$$

WW-Hamiltonian

Wir beschränken die Impulse auf Impulse die nicht weiter als ein proportional zur Bandbreite gegebener Faktor von der Fermie-Energie entfernt sind:

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \left[\sum_{-\Lambda < k - k_f < \Lambda} e^{ikx} c_k + \sum_{-\Lambda < k + k_f < \Lambda} e^{ikx} c_k \right]$$

$$\Psi(x) = \Psi_R(x) + \Psi_L(x)$$

Damit ergibt sich die Dichte:

$$\begin{aligned} \Psi^\dagger(x) \Psi(x) &= \Psi_R^\dagger(x) \Psi_R(x) + \Psi_L^\dagger(x) \Psi_L(x) \\ &\quad + [\Psi_R^\dagger(x) \Psi_L(x) + h.c.] \end{aligned}$$

WW-Hamiltonian

Die ersten beiden Terme gehören offensichtlich zu $q \sim 0$ da sie auf der gleichen Seite der Fermi-Oberfläche bleiben während die beiden hinteren Terme zu $q \sim 2k_F$ gehören wo ein Teilchen von einer Seite zur anderen transportiert wird.

Der g^4 -Prozess kann für die rechte gehenden geschrieben werden als:

$$\begin{aligned} \frac{g^4}{2} \Psi_R^\dagger(x) \Psi_R(x) \Psi_R^\dagger(x) \Psi_R(x) &= \frac{g^4}{2} \rho_R^\dagger(x) \rho_R(x) \\ &= \frac{g^4}{2} \frac{1}{(2\pi)^2} (\nabla \phi - \nabla \theta)^2 \end{aligned}$$

WW-Hamiltonian

Ähnlich für die links gehenden ($R \rightarrow L$ und $\phi - \theta \rightarrow \phi + \theta$) Damit erhalten wir insgesamt für die g4-WW:

$$\frac{g^4}{(2\pi)^2} \int dx [(\nabla \phi)^2 + (\nabla \theta)^2]$$

Vergleich freien Hamiltonian und g4-WW \Rightarrow
Renormierung der Geschwindigkeit der Anregungen:

$$u = v_F \left(1 + \frac{g^4}{\pi v_F} \right)$$

WW-Hamiltonian

Ähnlich können wir auch den g2-Prozess betrachten:

$$g^2 \Psi_R^\dagger(x) \Psi_R(x) \Psi_L^\dagger(x) \Psi_L(x) = \frac{g^2}{(2\pi)^2} [(\nabla\phi)^2 - (\nabla\theta)^2]$$

Dieser ändert im Gegensatz zum g4-Prozess nicht nur die Geschwindigkeit sondern auch die relativen Gewichte von $\nabla\phi$ und $\nabla\theta$. Diese Änderung der Gewichte kann in einen zusätzlichen dimensionslosen Parameter absorbiert werden.

WW-Hamiltonian

Wir können den Hamiltonian dann so schreiben:

$$H = \frac{1}{2\pi} \int dx \left[uK (\nabla\theta)^2 + \frac{u}{K} (\nabla\phi)^2 \right]$$

Dabei sind:

$$u = v_F \left[\left(1 + \frac{y^4}{2}\right)^2 - \left(\frac{y^2}{2}\right)^2 \right]^{1/2}$$

$$K = \left(\frac{1 + y^4/2 - y^2/2}{1 + y^4/2 + y^2/2} \right)^{1/2}$$

mit $y = \frac{g}{\pi v_F}$

Besetzungszahlwahrscheinlichkeit

Berechnung der Einteilchengreensfunktion für rechtsgehende Fermionen ($L \rightarrow \infty$):

$$\begin{aligned} G_R(r) &= - \langle \Psi_R(r) \Psi_R^\dagger(0) \rangle \\ &= - \frac{e^{ik_F x}}{2\pi\alpha} \langle e^{i(\phi(r)-\theta(r))} e^{-i(\phi(0)-\theta(0))} \rangle \end{aligned} \tag{1}$$

Daraus erhalten wir die Teilchenzahldichte:

$$n(k) = \int dx e^{-ikx} G_R(x, t = 0^-)$$

Besetzungszahlwahrscheinlichkeit

Wenn man das nun berechnet erhält man:

$$n(k) \propto |k - k_F|^{\frac{K+K^{-1}}{2} - 1}$$

