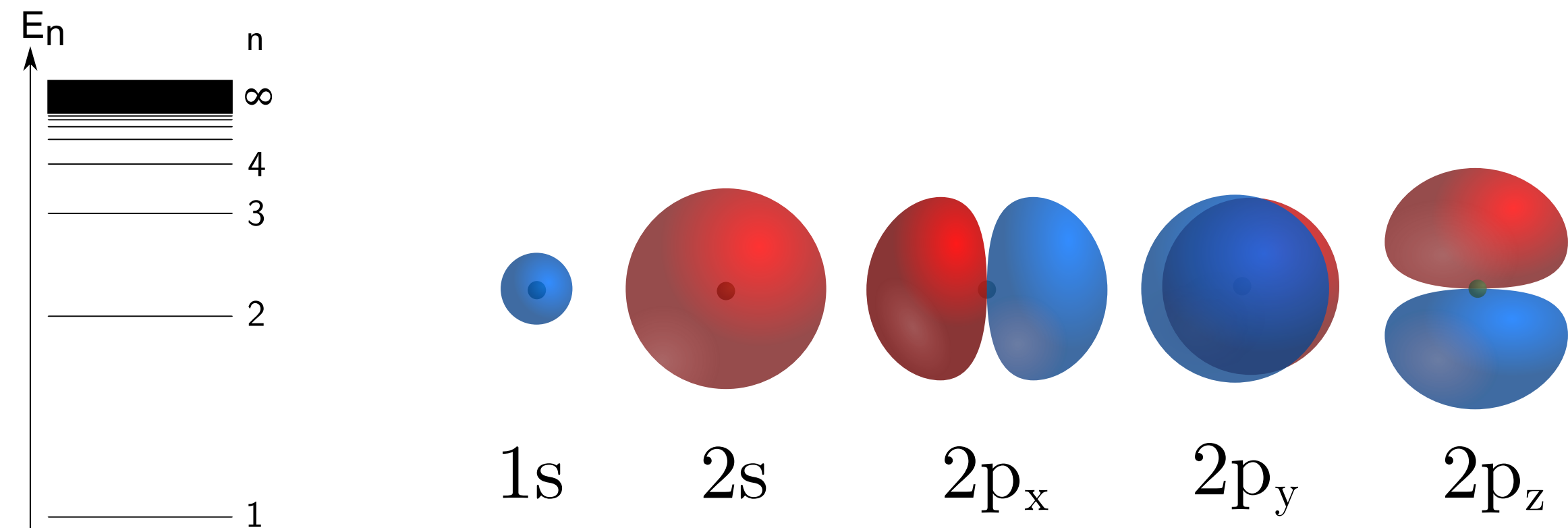


## Das Wasserstoffatom als Ausgangspunkt

- Reale Systeme bestehen meist aus vielen Atomen (Elektronen und Kernen)
- Das einfachste Beispiel hierfür ist das Wasserstoffatom mit einem Elektron und einem Kern
- Bekannt aus der Vorlesung: Das Elektron im Kernpotential wird durch die folgende Schrödingergleichung (SG) beschrieben:

$$\hat{H}\psi(\mathbf{r}) = \left( \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$$

- Lösen der SG ergibt **Eigenwerte**  $E_n = -\frac{Ry}{n^2}$  (Energien) und **Eigenfunktionen**  $\psi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi)$  (Wellenfunktionen bzw. Zustände) der Elektronen im Wasserstoffatom:



## Konzepte der Elektronenstrukturtheorie

- Prinzipiell muss zur Beschreibung eines Systems mit  $N_E$  Elektronen und  $N_K$  Atomkernen die SG für das Vielteilchenproblem gelöst werden:

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^{N_E} \frac{\hat{\mathbf{p}}_j^2}{2m} + \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{j=1}^{N_E} \sum_{j'=1, j \neq j'}^{N_E} \frac{1}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_{j'}|} + \sum_{l=1}^{N_K} \frac{\hat{\mathbf{p}}_l^2}{2M_l} + \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{l=1}^{N_K} \sum_{l'=1, l \neq l'}^{N_K} \frac{Z_l Z_{l'}}{|\mathbf{X}_l - \mathbf{X}_{l'}|} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{j=1}^{N_E} \sum_{l=1}^{N_K} \frac{Z_l}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{X}_l|}$$

- Einfache Modelle dienen zur Einarbeitung in die Thematik (zum Beispiel „Tight-Binding“ als Modell für quantenmechanische Bindung)
- Das Vielteilchenproblem wird auf ein effektives Einteilchenproblem reduziert:

$$\left( \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) + \hat{\Sigma} \right) |\psi_n\rangle = \epsilon_n |\psi_n\rangle \implies \epsilon_n, |\psi_n\rangle$$

⇒ „normale“ SG, aber mit komplizierterem periodischen Potential  $V(\mathbf{r})$  und zusätzlichem Term  $\hat{\Sigma}$ , der Vielteilcheneffekte berücksichtigt. Lösung ergibt wieder Energien  $\epsilon_n$  und Zustände  $|\psi_n\rangle$  der Elektronen

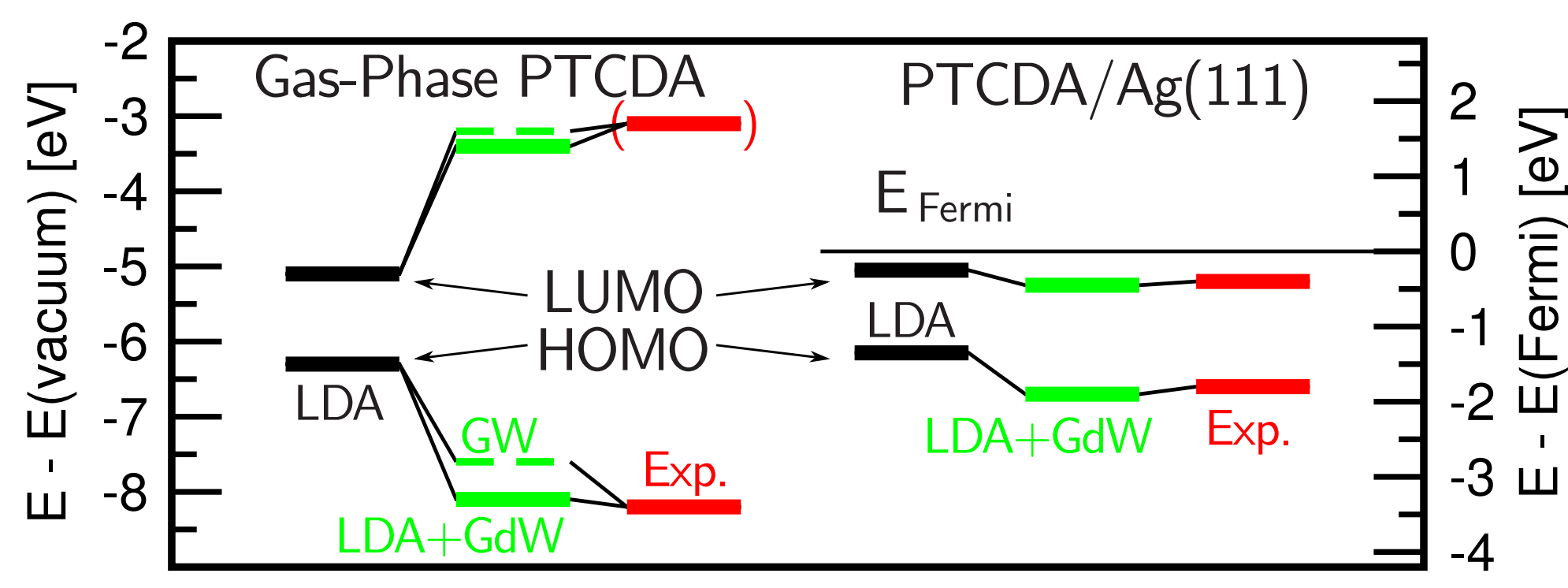
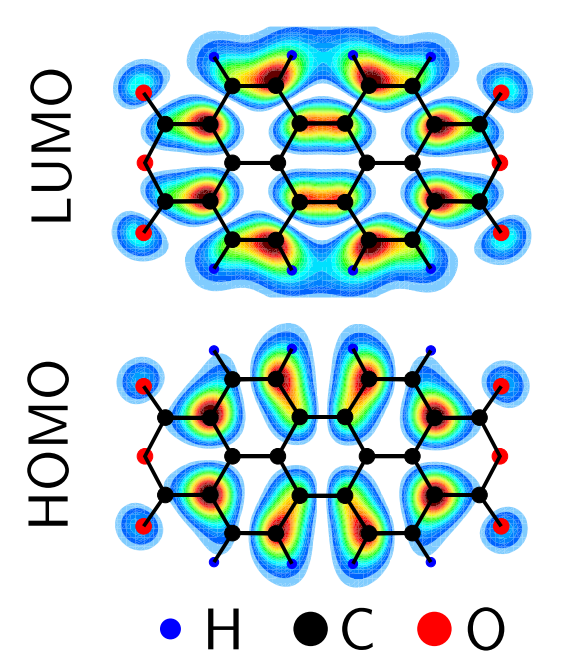
- *Ab initio*-Methoden (z.B. Dichtefunktionaltheorie, Vielteilchenstörungstheorie): Lösen der Schrödingergleichung für ein Vielteilchenproblem *ohne Modellparameter*

- Durch Minimierung der Gesamtenergie in Abhängigkeit von den Atomkoordinaten lässt sich die geometrische Struktur eines Systems berechnen
- Berechenbare Eigenschaften: Energie der Elektronen (Bandstruktur, Zustandsdichte), Ladungsdichte (Aufenthaltswahrscheinlichkeit), optische Absorptionsspektren, optimale Geometrie, ...

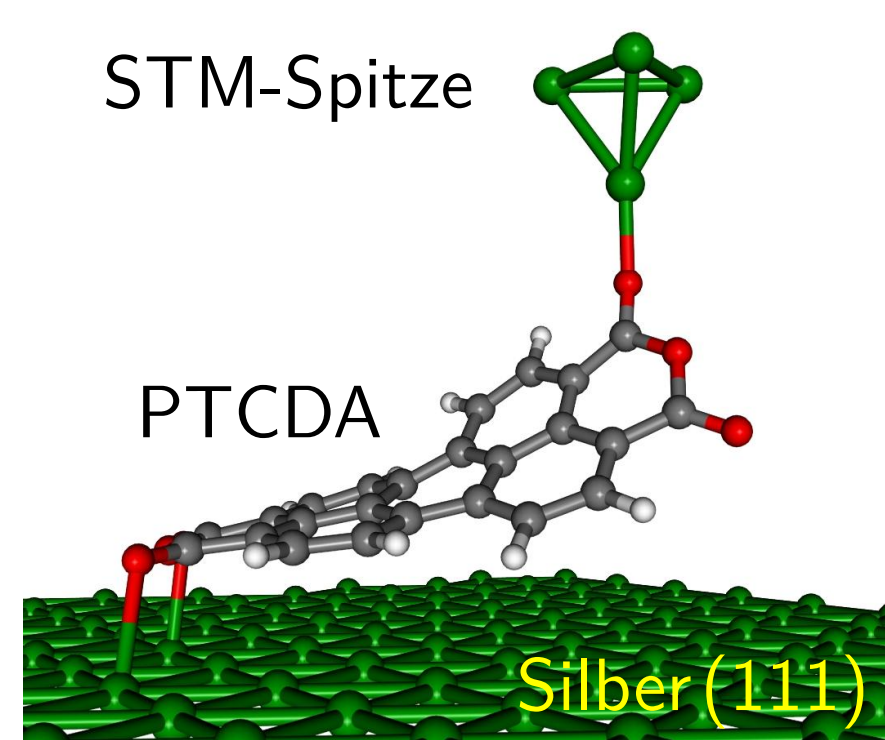
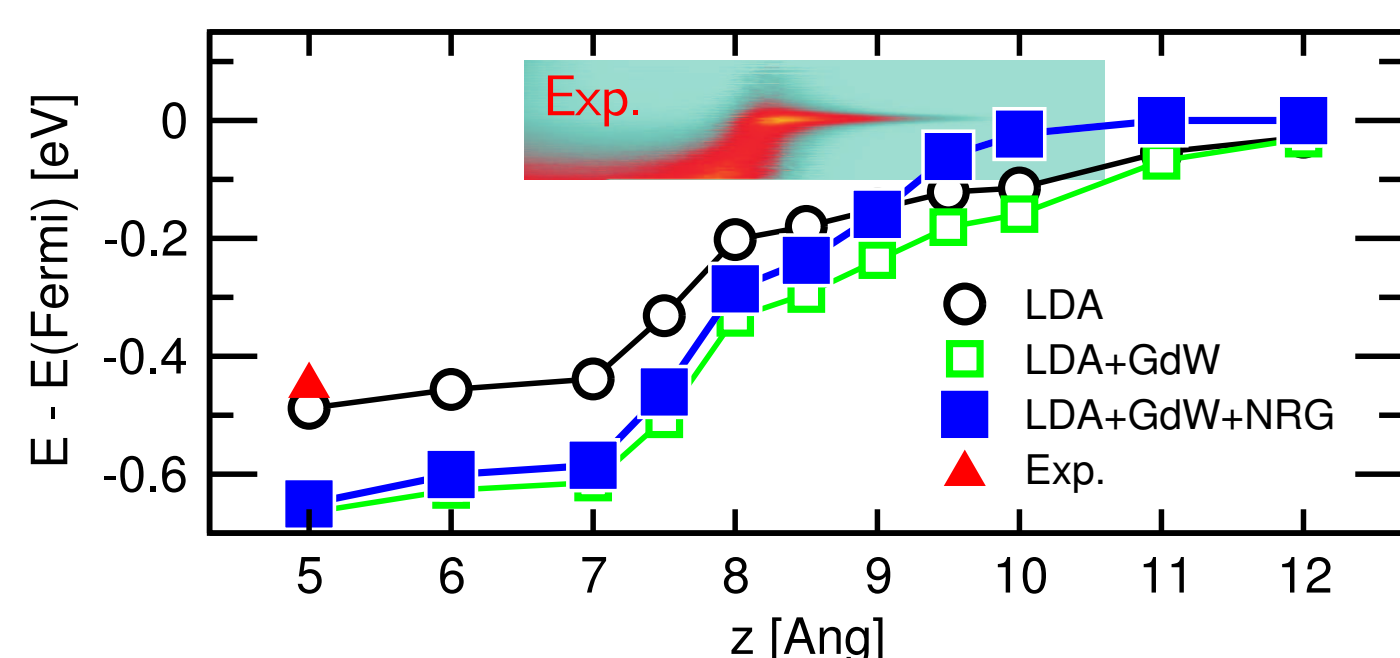
## (Organische) Moleküle

- Moleküle bilden endliche Anzahl von Bindungen aus  
⇒ Zustände (Molekülorbitale) mit anderen Eigenschaften als im Atom
- Ungeahntes Potenzial für zukünftige (opto)elektronische Anwendungen (Lichtemission, Photovoltaik, molekulare Schalter, Sensoren, Einzelelektronen-Transistoren, Spintronik)
- Besonders das höchste besetzte (HOMO) und das niedrigste unbesetzte (LUMO) Orbital sind interessant

PTCDA Ladungsdichte



- Kontaktierung mit etablierten Materialien (Silber- oder Goldelektroden) möglich
- Energetik kann durch Adsorption auf einem Substrat grundlegend verändert werden und bietet Ansatzpunkte für gezielte Manipulation (z. B. STM)



- Herausforderungen beim Verständnis schon bei einfachen Strukturen (z. B. Molekül auf glattem Substrat)  
⇒ Sehr verschiedene Stoffe (metallisches Substrat, halbleitendes Molekül und isolierendes Vakuum) müssen gemeinsam beschrieben werden

## Themenvorschläge für Bachelor- und Masterarbeiten

Die konkrete Ausgestaltung und der Umfang der nachfolgenden Themen hängen davon ab, ob sie im Bachelor- oder Masterstudiengang bearbeitet werden.

### Adsorbierte Monolagen mit Gitterfehlpassung

- Adsorbatschicht und Substratmaterial haben unterschiedliche Gitterkonstante
- Wettstreit zwischen lokaler und globaler Energetik
- Welche großflächige Struktur? Musterbildung?
- Methodik: Techniken der Molekulardynamik und Optimierung

### Reflektivität von Adsorbatschichten

- Adsorbierte Moleküle auf Metalloberfläche
- Metall: perfekte Lichtreflexion
- Molekulare Schicht: Lichtabsorption
- Welche optischen Eigenschaften hat das kombinierte System?
- Methodik: Elektrodynamik und Grenzflächenphysik

### Optische Spektren von Polymeren

- Polymere im Hinblick auf Anwendungen intensiv untersucht
- Optische Spektroskopie liefert Informationen über geometrischen Aufbau und elektronische Anregungen
- Theoretische Untersuchungen essentiell für Interpretation von Messungen
- Berechnung der optischen Eigenschaften von ausgewählten Polymeren mit Vielteilchenstörungstheorie
- Berücksichtigung des Einflusses von Exzitonen (Elektron-Loch-Paaren)

### Transport/elektronische Eigenschaften von Nanostrukturen: Anwendung der streutheoretischen Methode

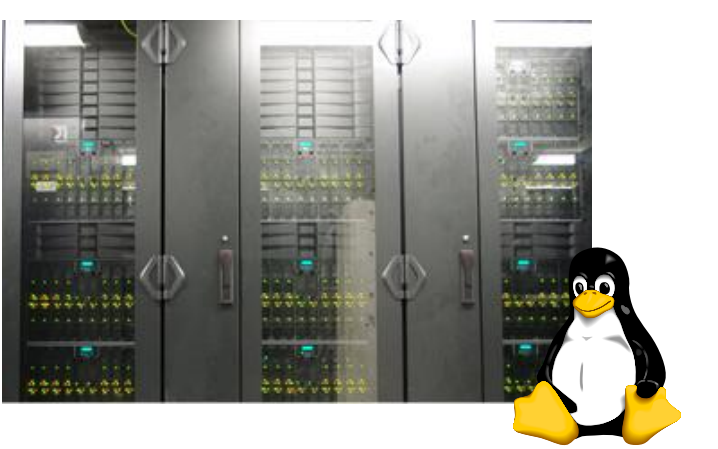
- Methode erlaubt es, nanoskalige Systeme ohne periodische Randbedingungen zu behandeln, z.B. Untersuchung des Transports durch Tunnelbarrieren oder Nanodrähte
- Zunächst: Untersuchung von Modellsystemen (Potentialwall, Doppelbarriere)
- Auch Streuung von Elektronen an Festkörperober-/grenzflächen berechenbar

- Elektron-Loch-Anregungen in einem Tight-Binding-Modell
- Methodische Weiterentwicklung der Vielteilchenstörungstheorie
- Weyl-Halbmatalle
- ... weitere Themen auf Nachfrage



## Themen einiger bisheriger Bachelor- und Masterarbeiten

- Spin-Bahn-Kopplung bei adsorbatbedeckten Halbleiteroberflächen
- Van-der-Waals Wechselwirkung zwischen harmonischen Oszillatoren
- Ab-initio Untersuchungen des topologischen Isolators Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>
- Modelluntersuchungen von Trionen: korrelierte Dreiteilchenzustände
- Elektronische Struktur von Dichalkogeniden
- Adsorbate auf Graphen und auf Metalloberflächen
- Spinphysik in dünnen Bleischichten



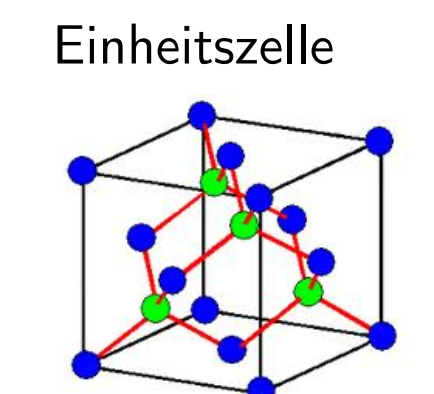
## Elektronen in Festkörpern

Festkörper: unendlich ausgedehnt, periodische Anordnung der Atome

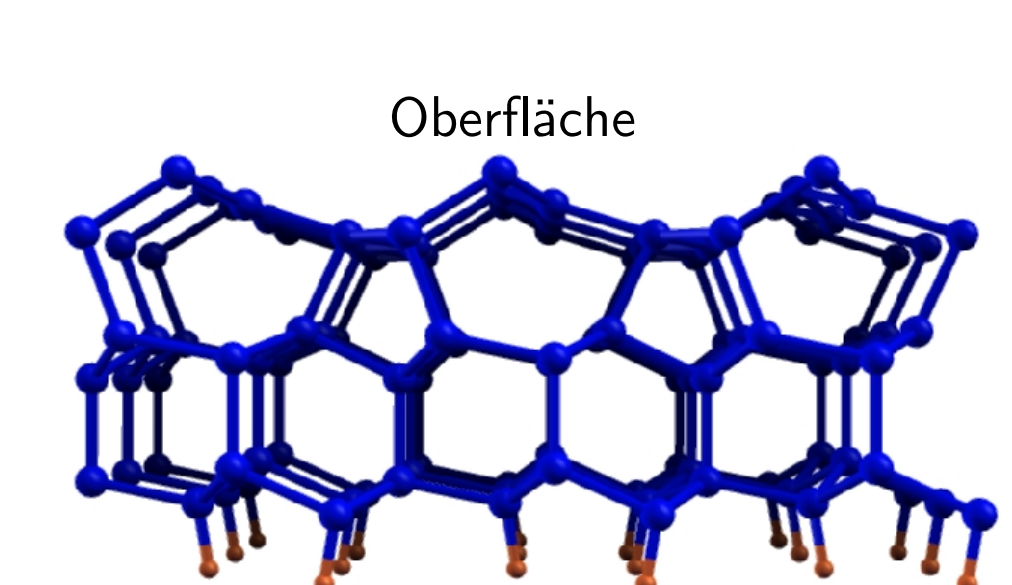
- Energieniveaus im Atom → Energiebänder im Festkörper
- Struktur im Realraum → elektronische Struktur im  $k$ -Raum
- Besonders interessant: **Oberflächen**  
Fehlende Bindungspartner ⇒ neue quantenmechanische Zustände
- Elektronische Struktur bestimmt optische Eigenschaften
- Erzeugung von **Exzitonen** (Elektron-Loch-Paaren) durch optische Anregungen
- exemplarisch: **Silizium** – meist verwendeter Halbleiter und Standardmaterial der Grundlagenforschung

### Grundlagenforschung für elektronische und optische Bauelemente

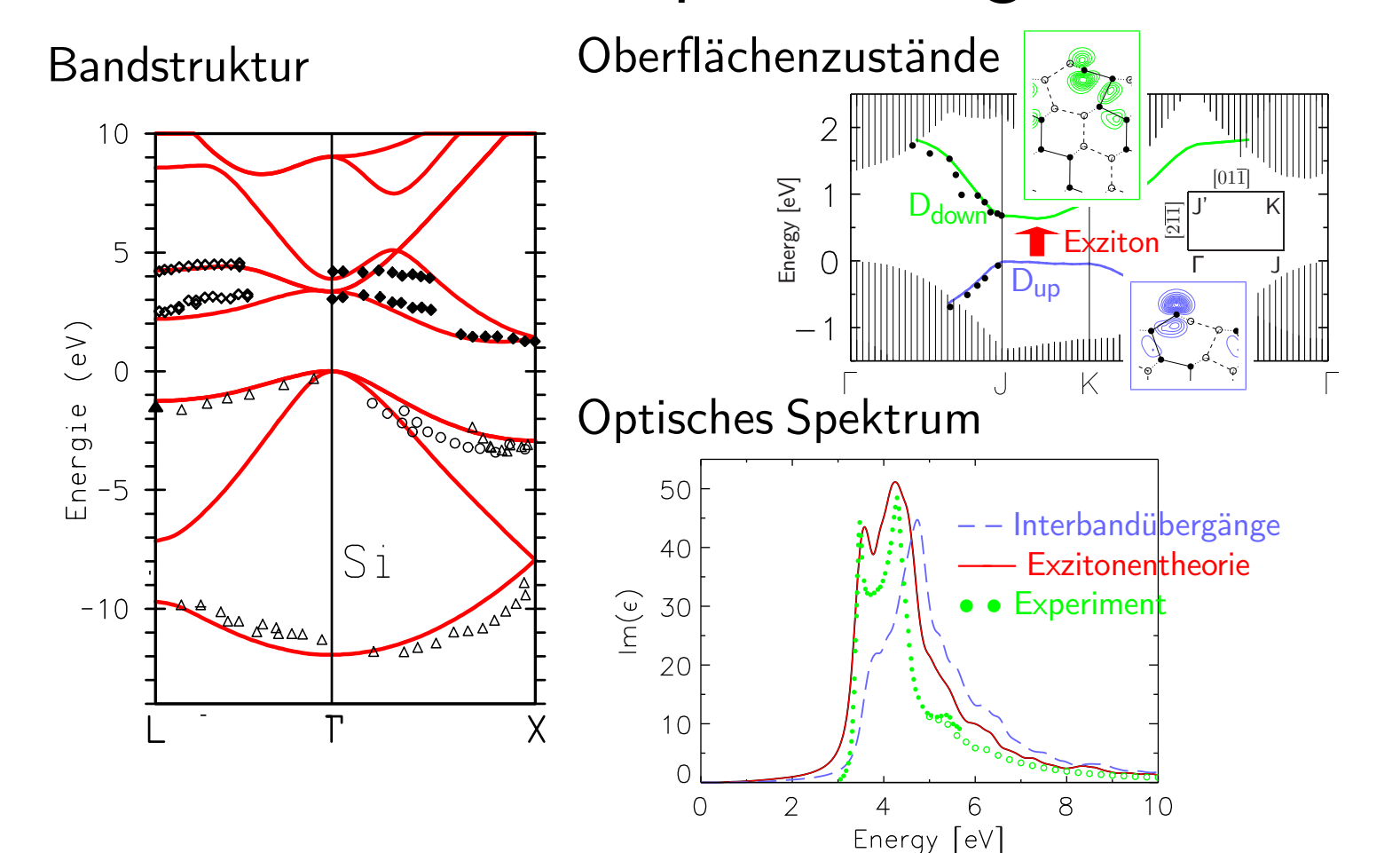
#### Geometrie



#### Silizium



#### Elektronische und optische Eigenschaften



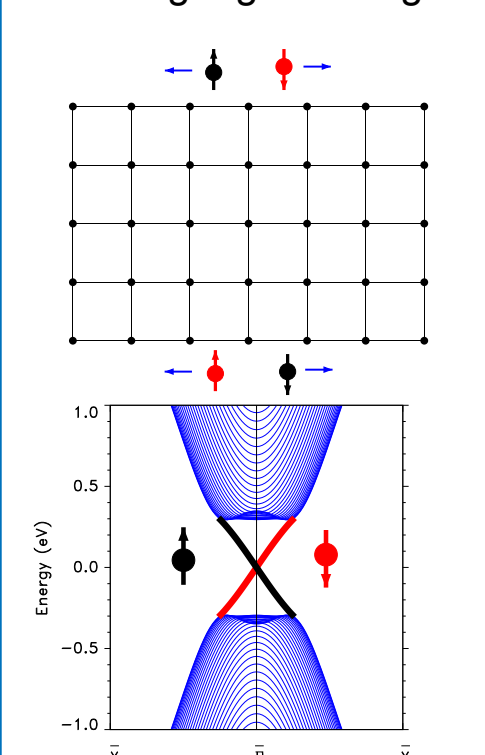
## Besondere Effekte der Spin-Bahn-Wechselwirkung

### Rashba-Effekt

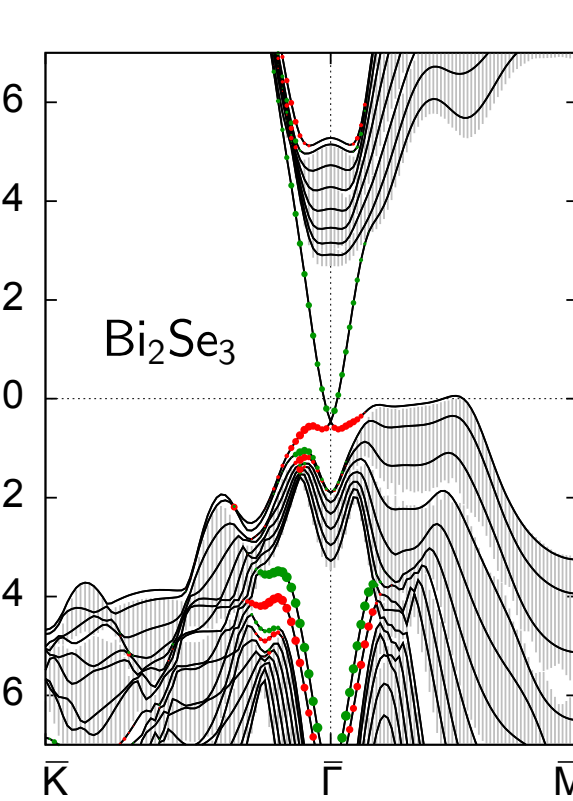
- Potentialgradient an Oberfläche + Spin-Bahn-Wechselwirkung  
→ spinpolarisierte, aufgespaltene Zustände
- Trennung nach Spin-up und Spin-down
- Besonders stark bei schweren Elementen
- Vergleich von Modellstudien und realen Systemen

### Höchst interessant für Anwendungen!

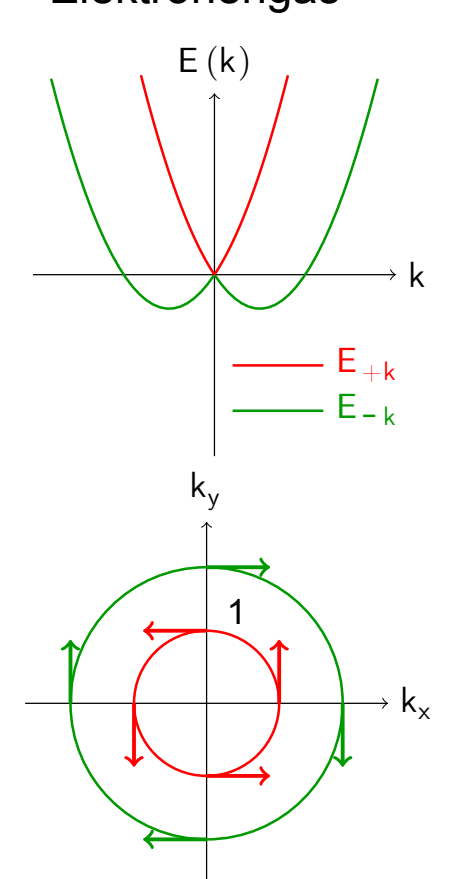
#### Modell: Kopplung von Spin und Bewegungsrichtung



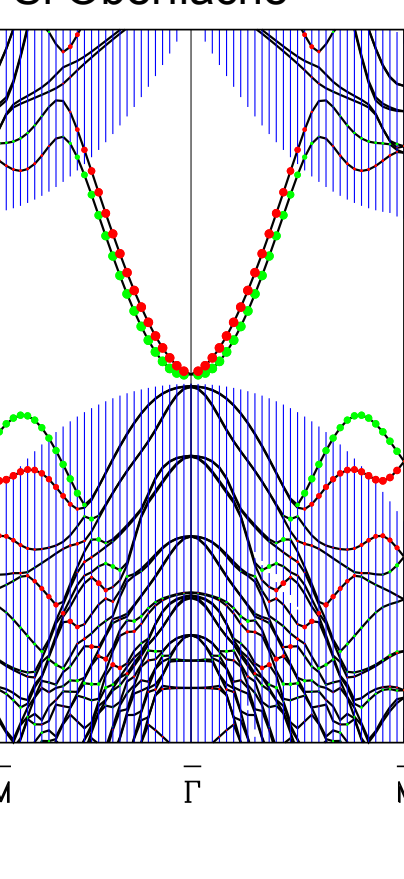
#### Reales System:



#### Modell: Rashba-Effekt beim Elektronengas



#### Reales System: Eine Lage Si auf Si-Oberfläche



### Topologische Isolatoren

- Starke Spin-Bahn-Wechselwirkung führt hier zu grundlegend neuen Materialeigenschaften
- Durch Symmetrie geschützte metallische Zustände mit linearer Dispersion  
→ Stromleitung *nur* an der Oberfläche
- Lineare Dispersion aus Dirac-Gleichung bekannt → Dirac-Fermionen
- Fester Zusammenhang von Bewegungsrichtung und Spin (Helizität)