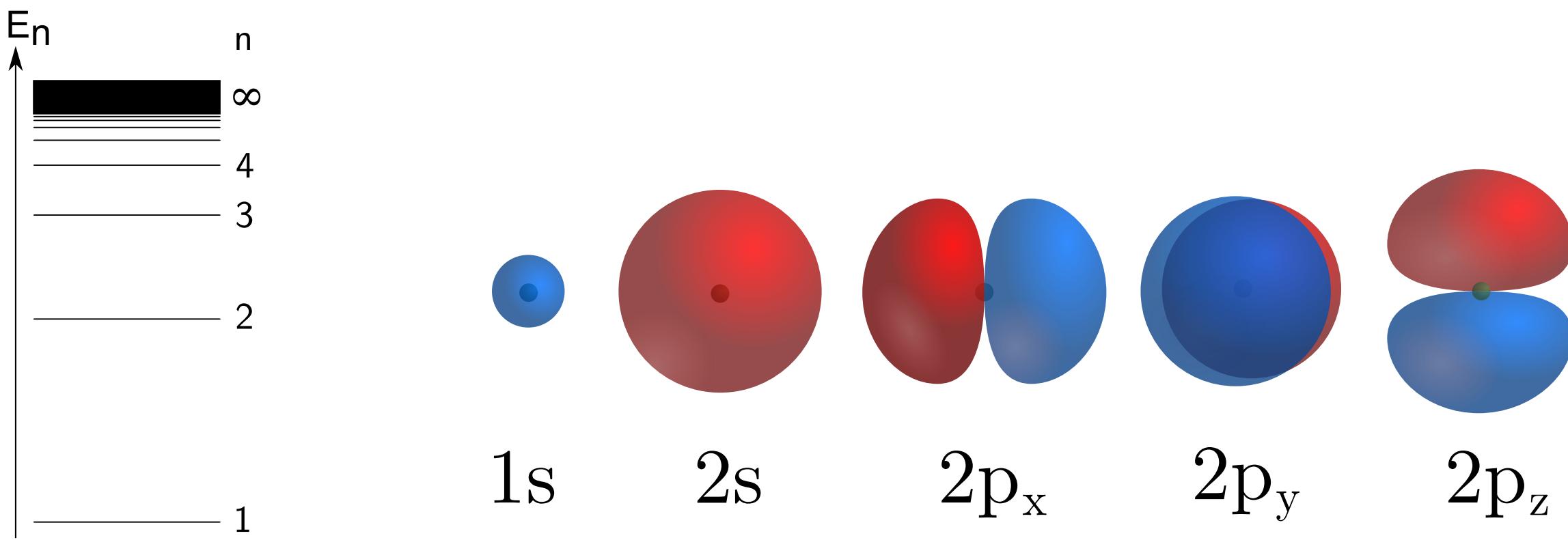


Das Wasserstoffatom als Ausgangspunkt

- 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 Schrödinger-Gleichung (SG) beschrieben:

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

- Lösen der SG ergibt **Eigenwerte** $E_n = -\frac{Ry}{n^2}$ (Energien) und **Eigenfunktionen** $\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$ (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:

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

- 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:

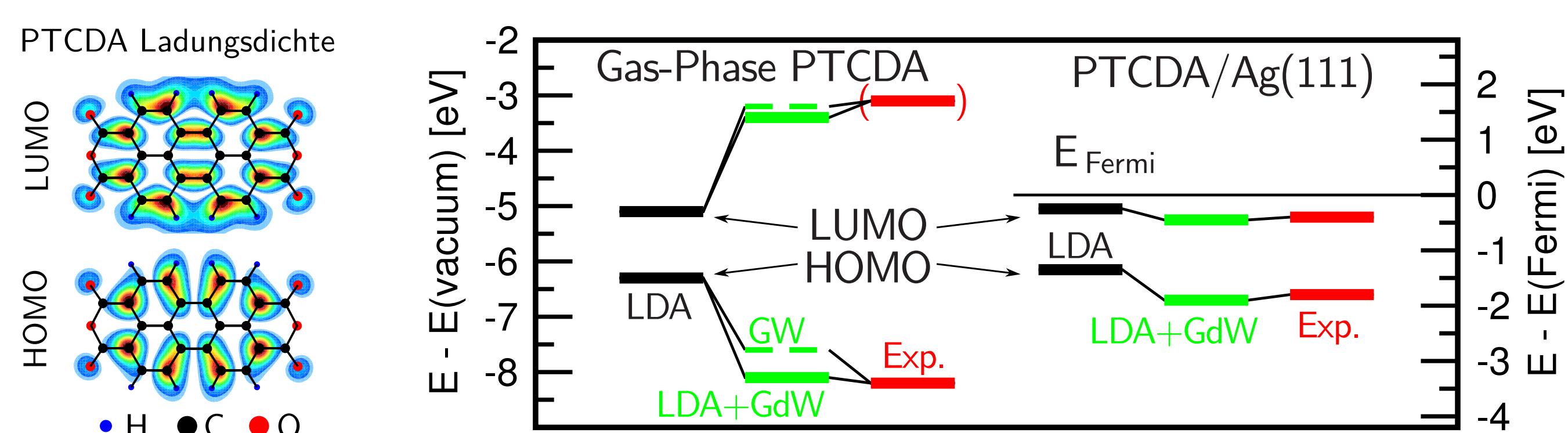
$$\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) + \hat{\Sigma} \right) |\psi_n\rangle = \epsilon_n |\psi_n\rangle \implies \epsilon_n, |\psi_n\rangle$$

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

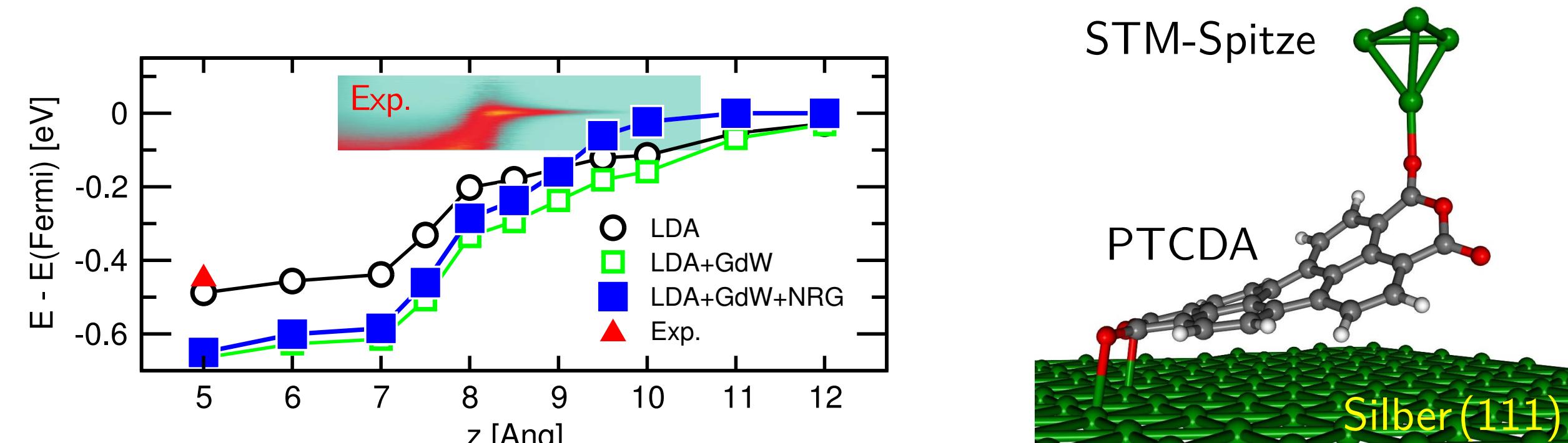
- Ab initio-Methoden (z.B. Dichtefunktionaltheorie, Vielteilchenstörungstheorie): Lösen der Schrödinger-Gleichung für ein Vielteilchenproblem *ohne Modellparameter*
- Durch Minimierung der Gesamtenergie in Abhängigkeit von den Atomkoordinaten lässt sich die geometrische Struktur eines Systems berechnen
- Berechenbare Eigenschaften: Energie der Elektronen (Bandstruktur, Zustandsdichte), Ladungsdichte (Aufenthaltswahrscheinlichkeit), optische Absorptionspektren, 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



- 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

Optoelektronik unter Druck und Verzerrung

- Zusammenhang zwischen Belastung und Verformung
- Auswirkungen auf optische Übergänge
- Grenzen des linearen Verhaltens
- Methodik: Dichtefunktionaltheorie und Vielteilchenstörungstheorie

Moiré Exzitonen in TMDC Heterobilagen

- Transition-Metal Dichalcogenides: zweidimensionale Halbleiter
- Hetero-Bilage, z.B. WS₂ auf MoS₂
- Moiré-Muster durch Verschiebung und Drehwinkel zwischen den Schichten
- Ladungstransfer-Exziton: Elektron auf der einen, Loch auf der anderen Schicht.
- Methodik: Effektiv-Massen-Modell für Exzitonen.

Molekulare Adsorbate auf Oberflächen und 2D-Monolagen

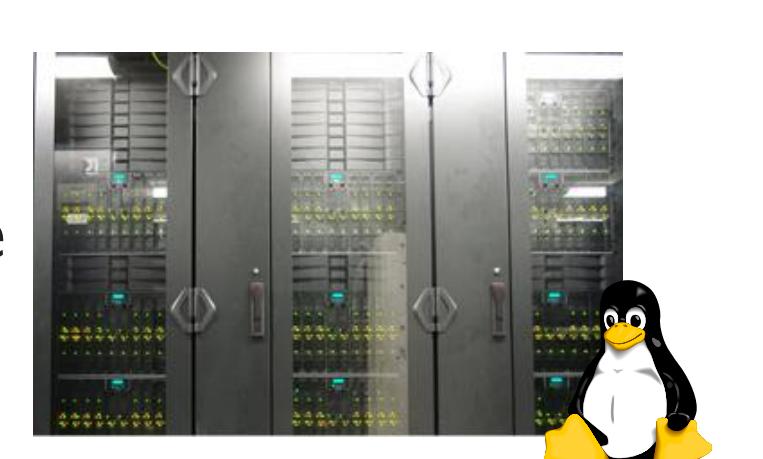
- Struktur und Dynamik
- optoelektronische Eigenschaften
- Substrat-Adsorbat-Kopplung
- Methodik: Dichtefunktionaltheorie und geeignete Modellierung

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



Themen einiger bisheriger Bachelor- und Masterarbeiten

- Oberflächenzustände von Tl und Bi Adlagen auf Silizium
- Van-der-Waals Wechselwirkung zwischen harmonischen Oszillatoren
- Ab-initio Untersuchungen des topologischen Isolators Bi₂Se₃
- Modelluntersuchungen von Trionen: korrelierte Dreiteilchenzustände
- Elektronische Struktur von Dichalkogeniden
- Adsorbate auf Graphen und auf Metallooberflächen
- Spinphysik in dünnen Bleischichten



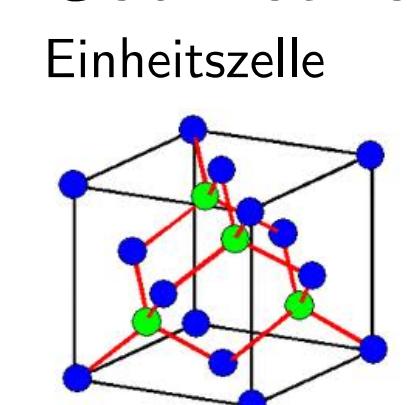
Elektronen in Festkörpern

Festkörper: unendlich ausgedehnt, periodische Anordnung der Atome

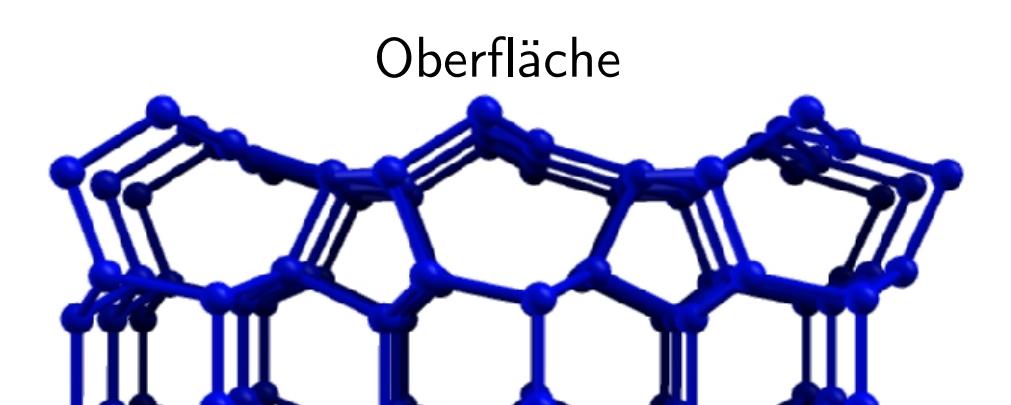
- Energieniveaus im Atom → Energiebänder im Festkörper
- Struktur im Realraum → elektronische Struktur im k -Raum
- Besonders interessant: **Oberflächen**
Fehlende Bindungspartner ⇒ neue quantenmechanische Zustände
- Elektronische Struktur bestimmt optische Eigenschaften
- Erzeugung von **Exzitonen**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

Geometrie

Einheitszelle



Silizium



Elektronische und optische Eigenschaften

Bandstruktur

Oberflächenzustände

Optisches Spektrum

Interbandübergänge

Exzitontheorie

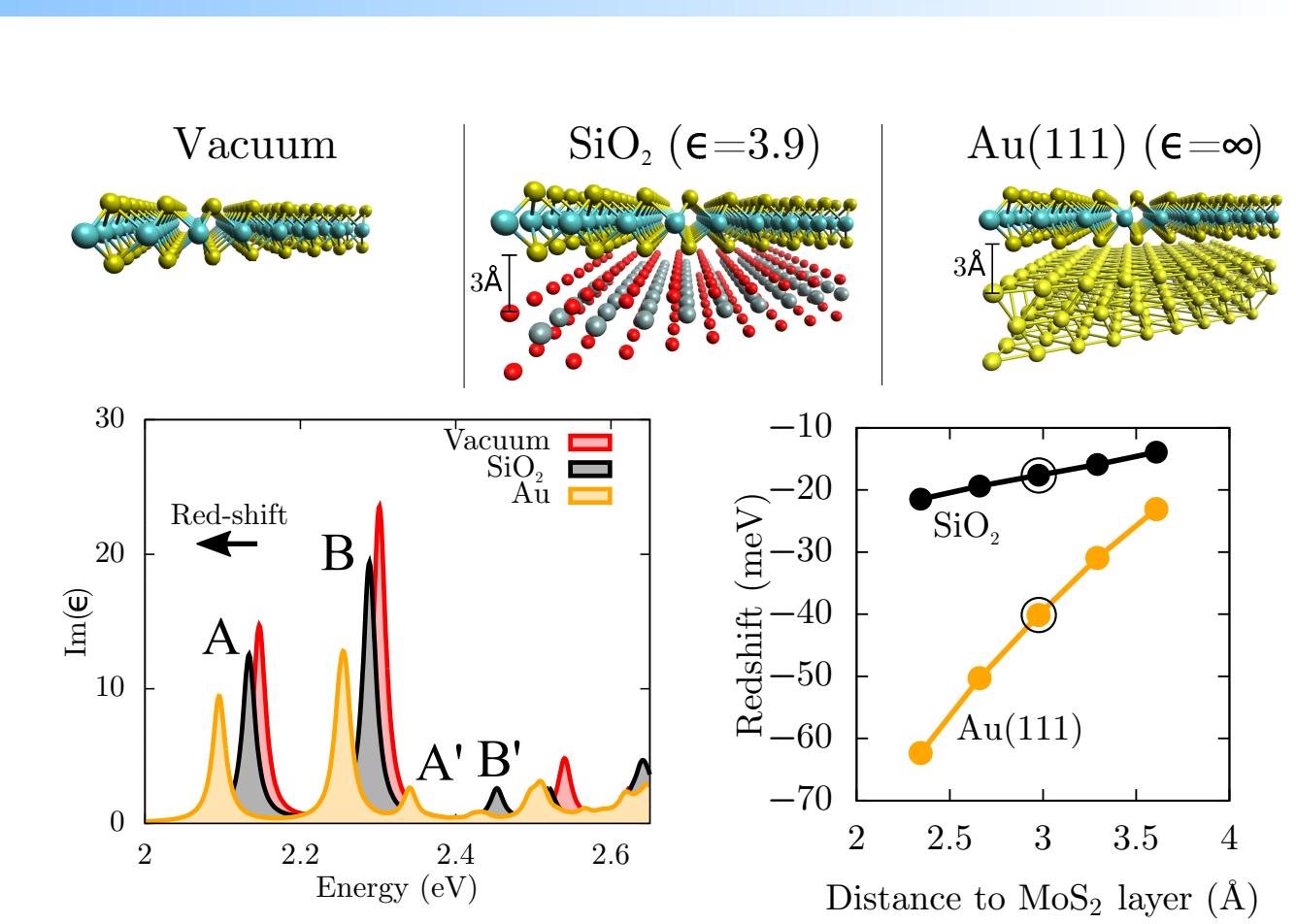
Experiment

Grundlagenforschung für elektronische und optische Bauelemente

Zweidimensionale Materialien

Übergangsmetall-Dichalkogenide (MoS₂ etc.)

- Zweidimensionale Monolagen (< 1 nm dick)
- Stapelbildung durch van der Waals Wechselwirkung: Bilagen, Multilagen, auf Substraten, ...
- halbleitend, mit charakteristischer Spin-Struktur
- Intralagen- und Interlagen-Exzitonen ⇒ optische Eigenschaften
- Heterobilagen mit Moiré-Musterbildung
- Hybridsysteme mit Ferromagneten, mit organischen Halbleitern, etc.



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)

