

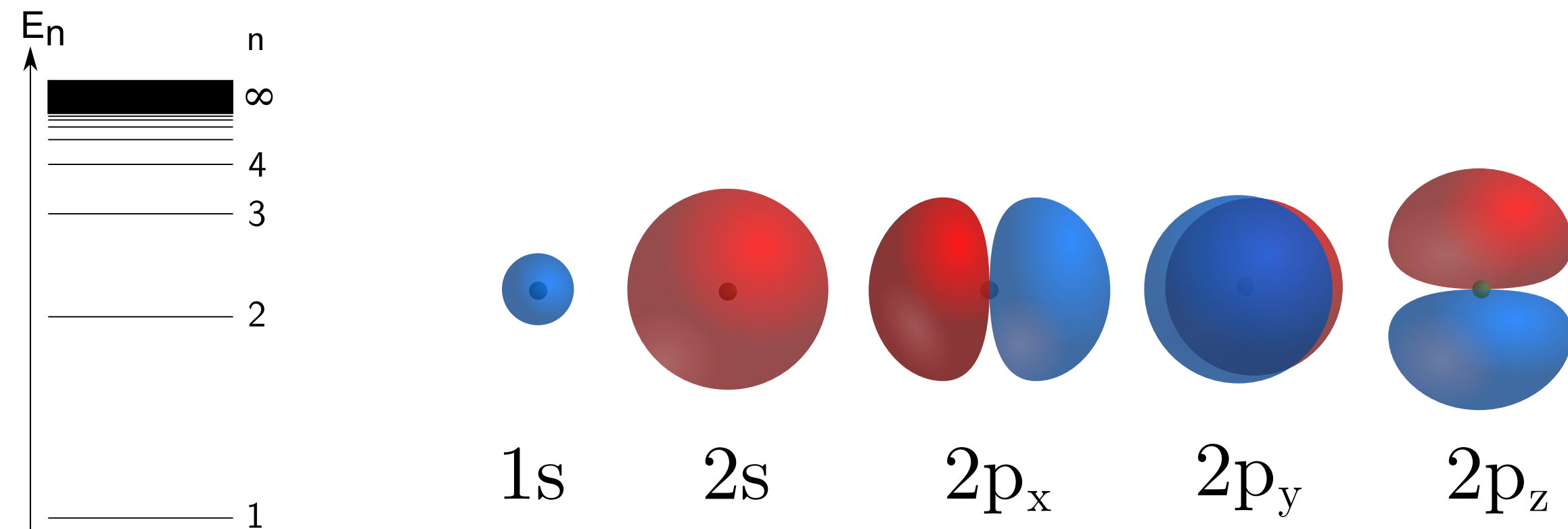


Das Wasserstoffatom als Ausgangspunkt

- 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:

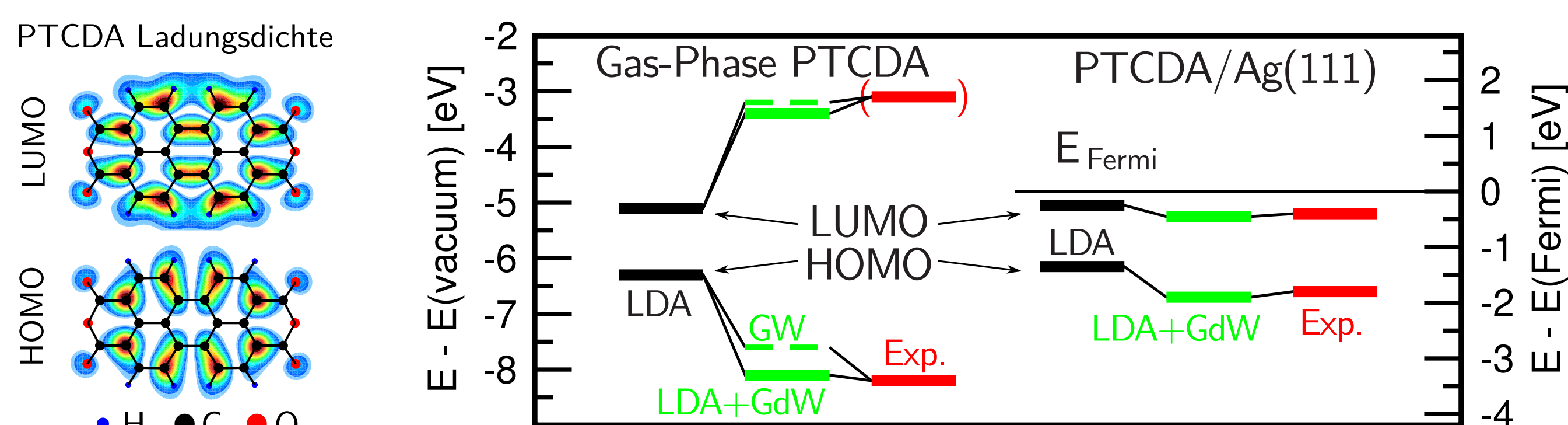
$$\left(\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) + \hat{\Sigma} \right) |\psi_n\rangle = \epsilon_n |\psi_n\rangle \implies \epsilon_n, |\psi_n\rangle$$

\implies „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

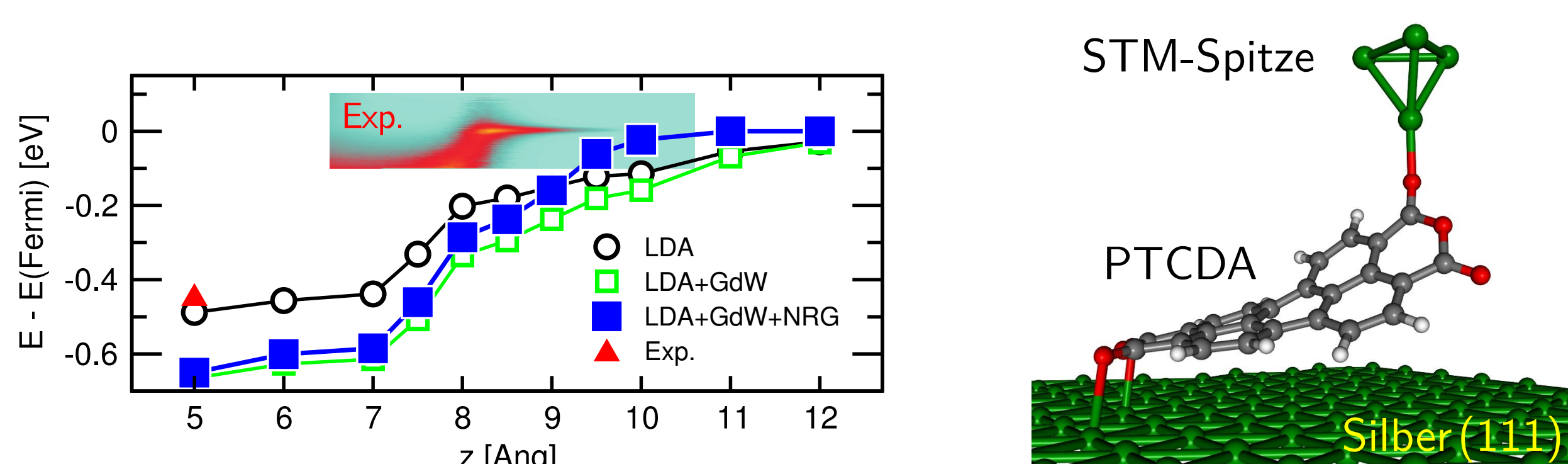
- *Ab initio*-Methoden (z.B. Dichtefunktionaltheorie, Vielteilchenstörungstheorie): Lösen der Schrödingergleichung für ein Vielteilchenproblem *ohne Modellparameter*
- Durch Minimierung der Gesamtenergie in Abhängigkeit von den Atomkoordinaten lässt sich die geometrische Struktur eines Systems berechnen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

(Organische) Moleküle

- Moleküle bilden endliche Anzahl von Bindungen aus
 \implies 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)
 \implies 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 Verzerung

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

Molekulare Adsorbate auf Oberflächen und 2D-Monolagen

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

Moiré Exzitonen in TMDC Heterobilagen

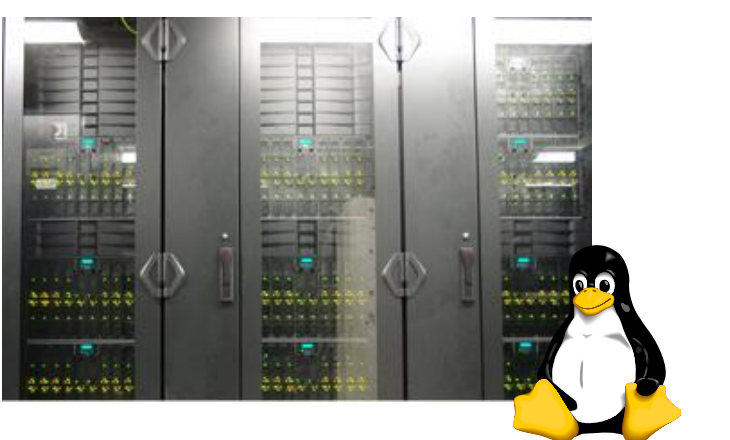
- Transition-Metal Dichalcogenides: zweidimensionale Halbleiter
- Hetero-Bilage, z.B. WS₂ auf MoS₂
- Moiré-Muster durch Verschiebung und Drehwinkel zwischen den Schichten
- Ladungstransfer-Exziton: Elektron auf der einen, Loch auf der anderen Schicht.
- Methodik: Effektiv-Massen-Modell für Exzitonen.

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



Themen einiger bisheriger Bachelor- und Masterarbeiten

- Oberflächenzustände von TI 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 Metalloberflächen
- Spinphysik in dünnen Bleischichten



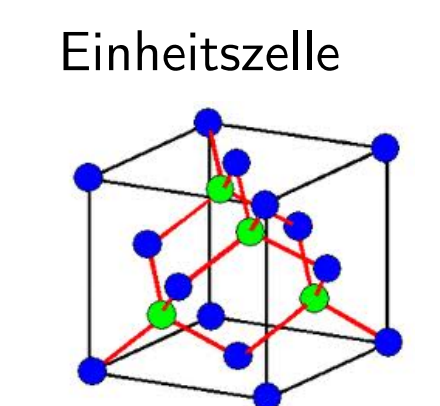
Elektronen in Festkörpern

Festkörper: unendlich ausgedehnt, periodische Anordnung der Atome

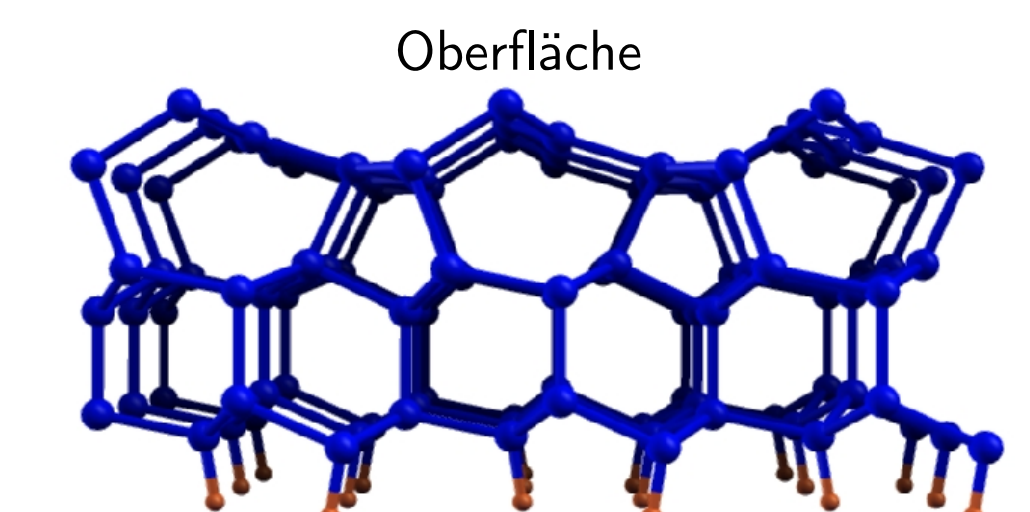
- Energieniveaus im Atom \rightarrow Energiebänder im Festkörper
- Struktur im Realraum \rightarrow elektronische Struktur im k -Raum
- Besonders interessant: **Oberflächen**
Fehlende Bindungspartner \implies neue quantenmechanische Zustände
- Elektronische Struktur bestimmt optische Eigenschaften
-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

Grundlagenforschung für elektronische und optische Bauelemente

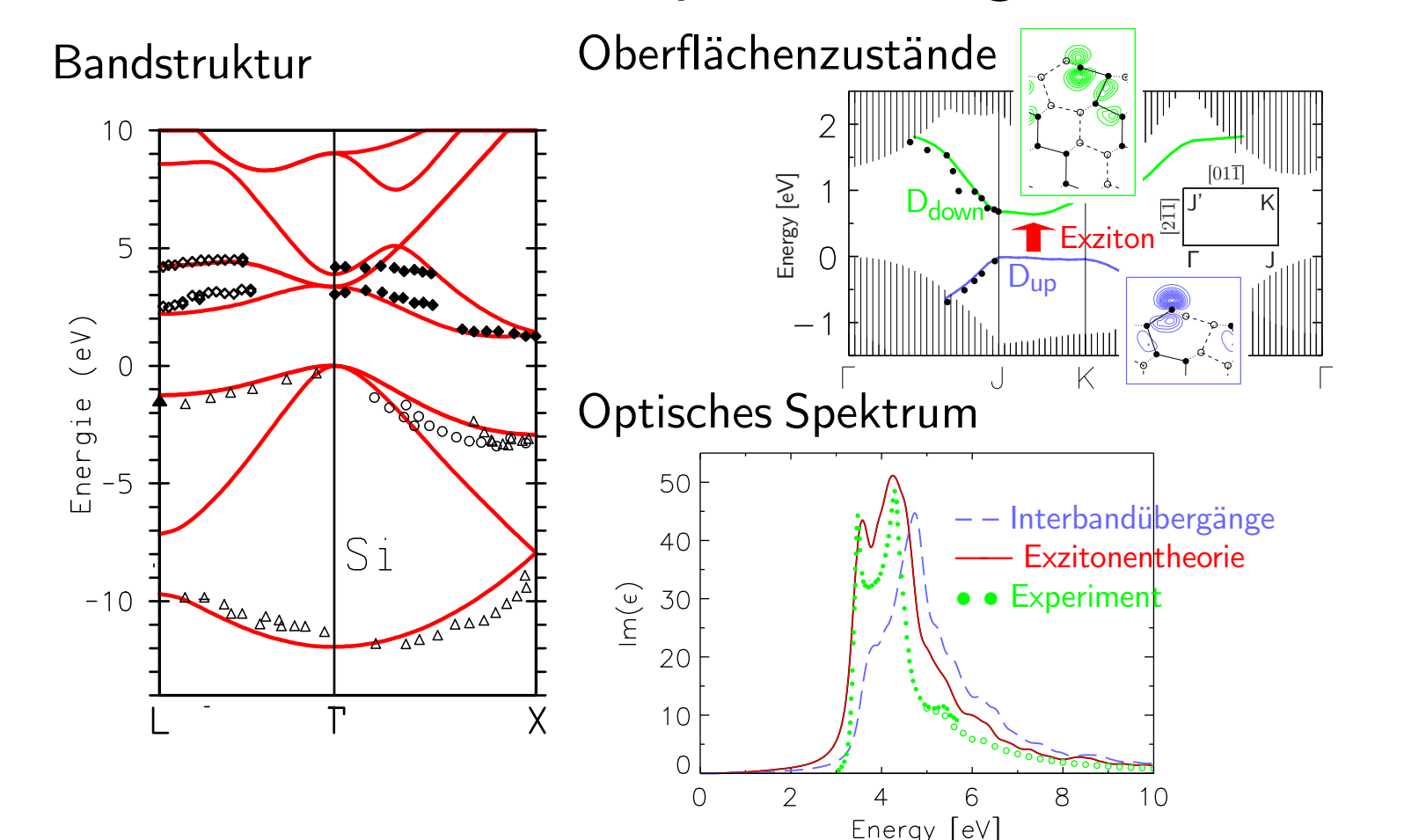
Geometrie



Silizium



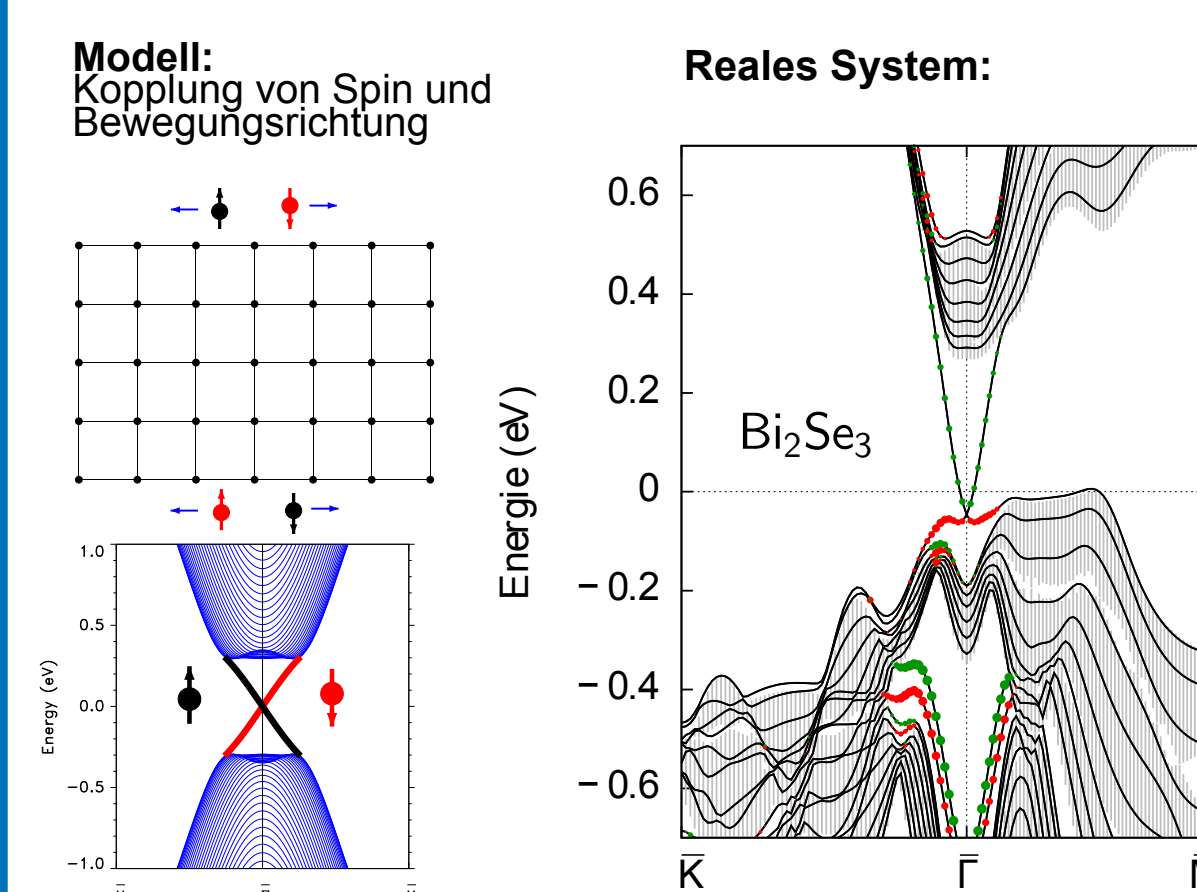
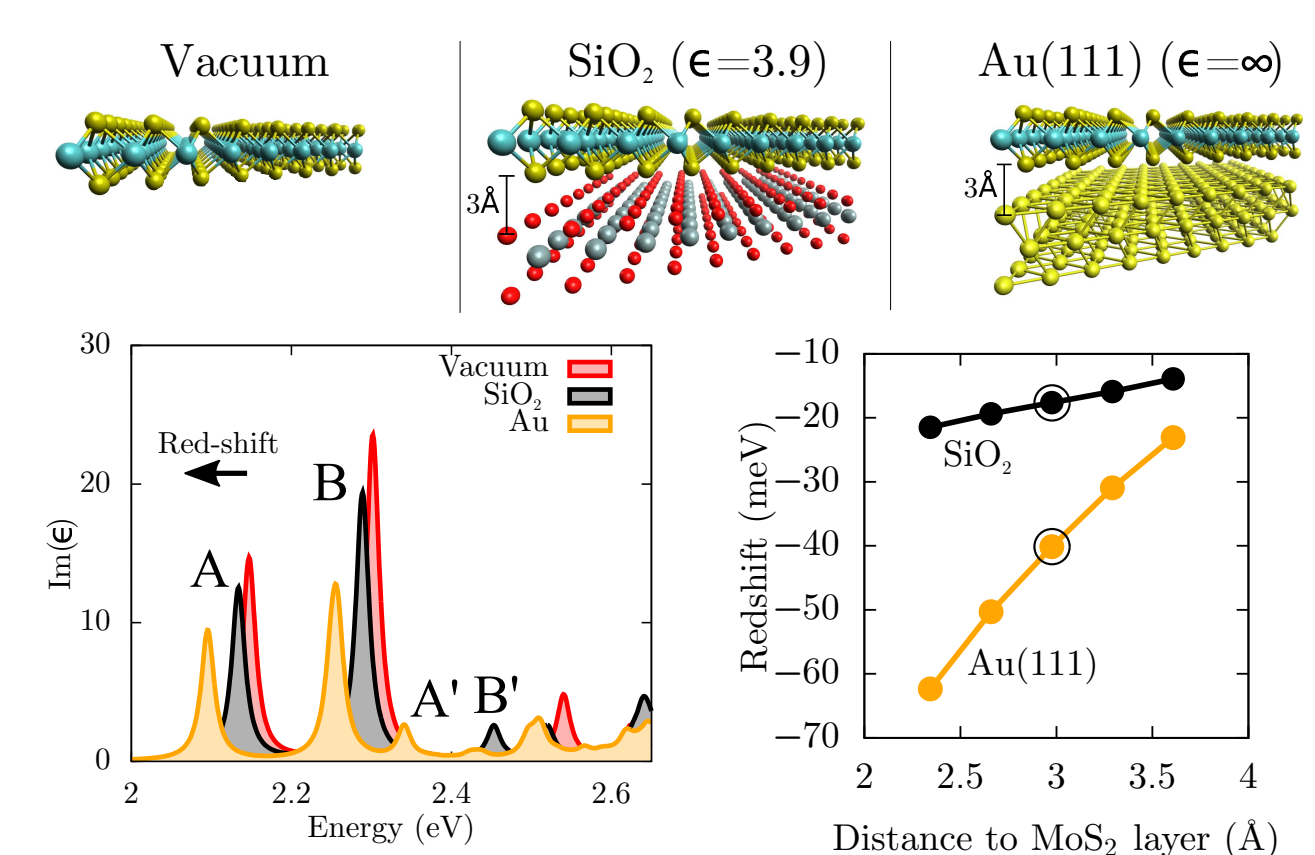
Elektronische und optische Eigenschaften



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 \implies 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
 \rightarrow Stromleitung *nur* an der Oberfläche
- Lineare Dispersion aus Dirac-Gleichung bekannt \rightarrow Dirac-Fermionen
- Fester Zusammenhang von Bewegungsrichtung und Spin (Helizität)