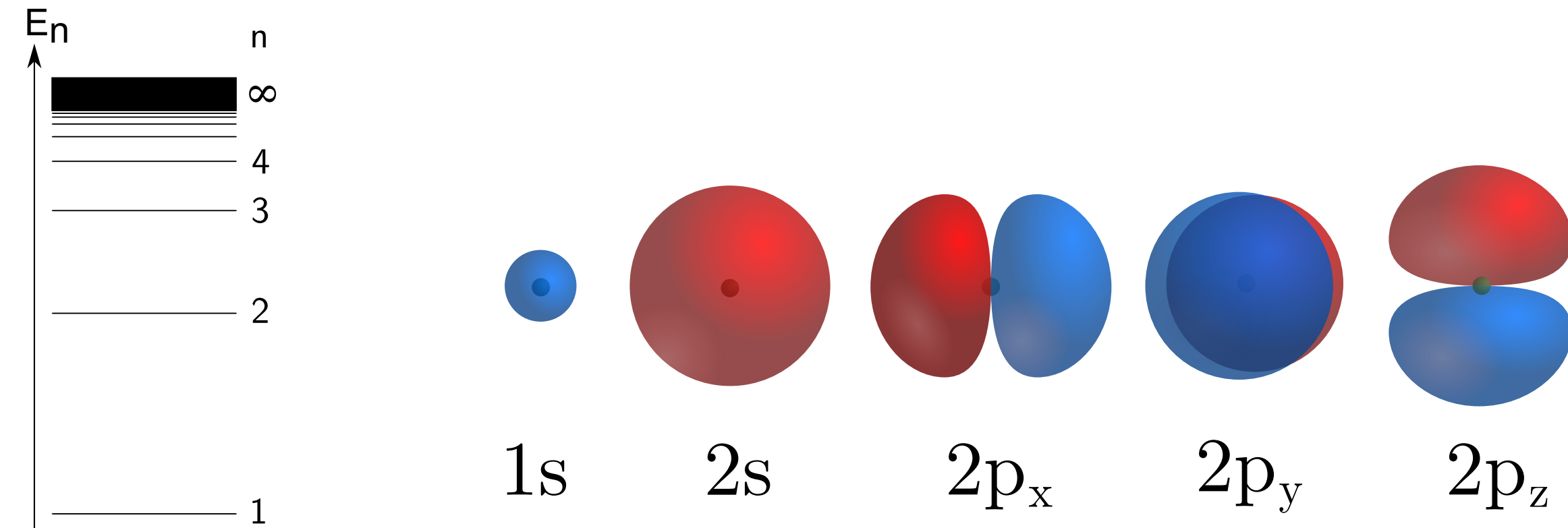


## Ausgangspunkt:

- Das einfachste Beispiel: Wasserstoffatom mit einem Elektron und einem Kern
- Bekannt aus der Vorlesung: Das Elektron im Kernpotential wird durch die folgende Schrödingergleichung (SG) beschrieben:

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

- 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:



## Was ist Elektronenstrukturtheorie?

- Prinzipiell: SG für das Vielteilchenproblem ( $N_E$  Elektronen und  $N_K$  Atomkernen):

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

- Einfache Modelle (zum Beispiel „Tight-Binding“ für quantenmechanische Bindung)
- Effektives Einteilchenproblem:

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

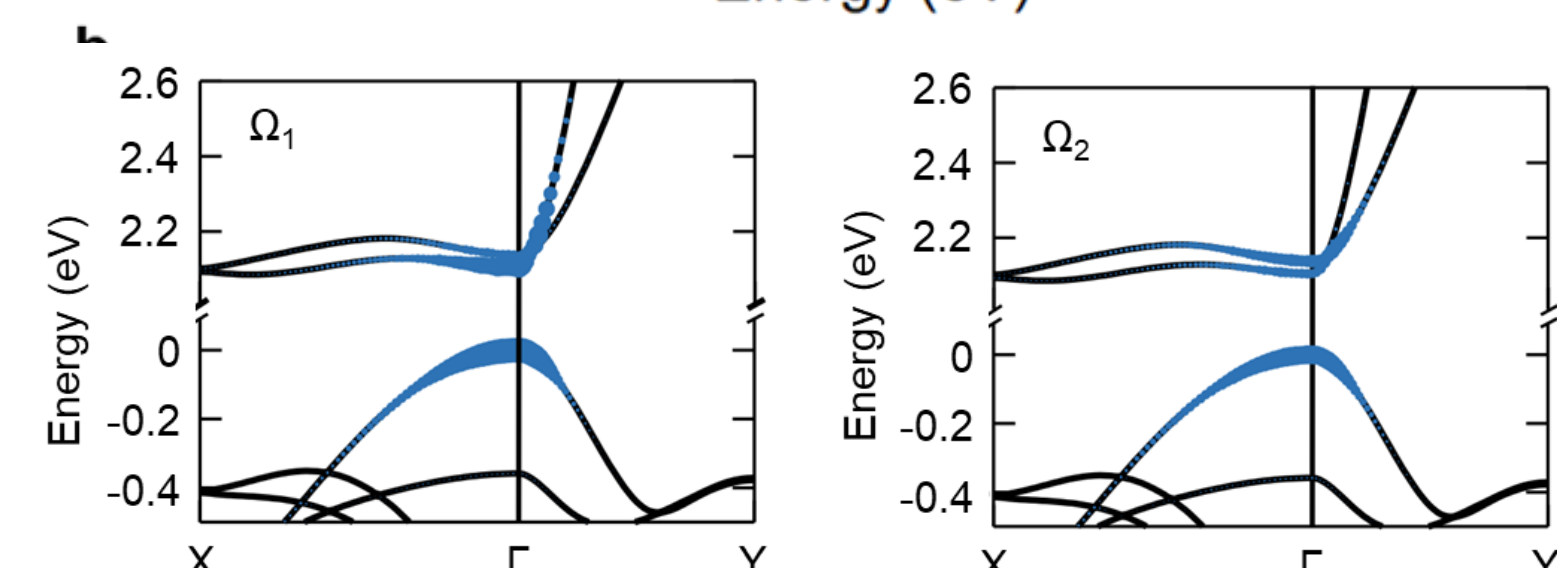
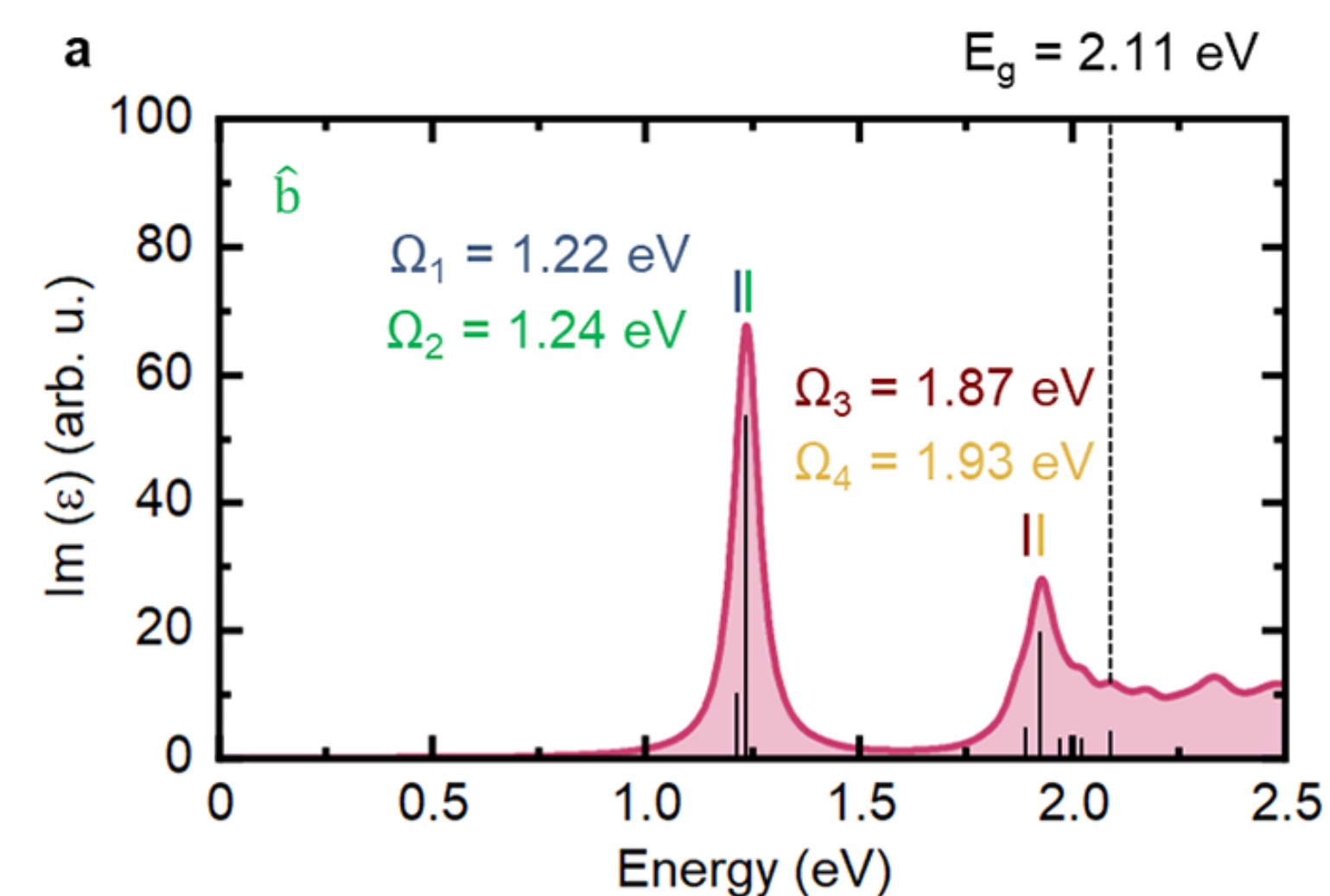
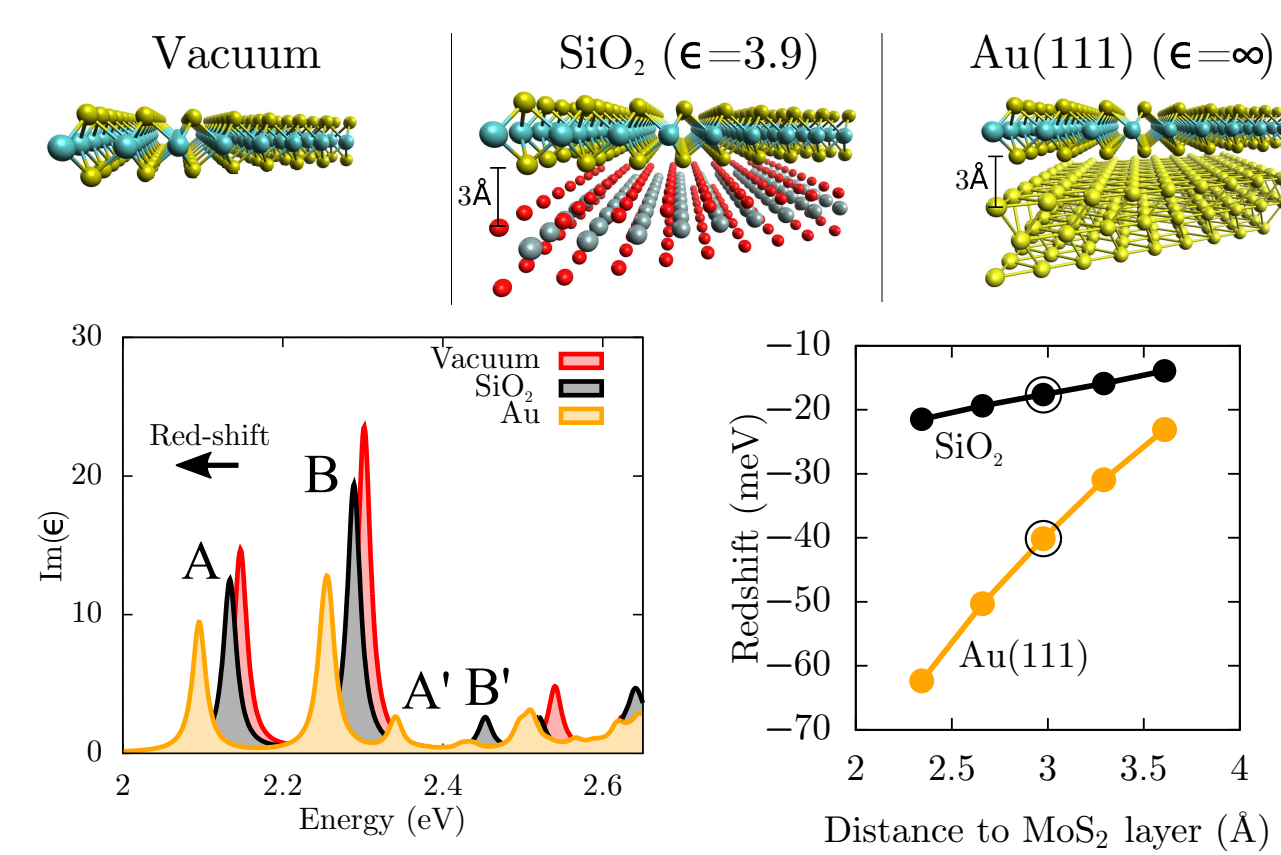
- „normale“ SG, aber mit periodischen Potential  $V(\mathbf{r})$  und Vielteilcheneffekten  $\hat{\Sigma}$
- Ab initio*-Methoden (z.B. Dichtefunktionaltheorie, Vielteilchenstörungstheorie): Lösung *ohne Modellparameter*

- Durch Minimierung der Gesamtenergie: Optimale geometrische Struktur
- Berechenbare Eigenschaften: Energie der Elektronen (Bandstruktur, Zustandsdichte), Ladungsdichte (Aufenthaltswahrscheinlichkeit), optische Absorptionsspektren, ...

## Zweidimensionale Materialien

### Übergangsmetall-Dichalkogenide (MoS<sub>2</sub> etc.)

- Zweidimensionale Monolagen (< 1 nm dick)
  - Durch van der Waals Wechselwirkung: Bilagen, Multilagen, auf Substraten, ...
  - Interessante optische Eigenschaften
  - Bilagen mit Moiré-Strukturen
  - Kombination mit Ferromagneten, mit organischen Halbleitern, etc.
- ⇒ Optoelektronische Bauelemente



### Zweidimensionaler Ferromagnet: CrSBr

- Ferromagnetismus innerhalb einer Schicht
  - Antiferromagnetismus zwischen Schichten
  - Interessante Spin-Struktur
  - CrSBr: Starke Richtungsabhängigkeit der Elektronen und optischen Eigenschaften
- ⇒ Manipulation der optischen Eigenschaften durch externes B-Feld

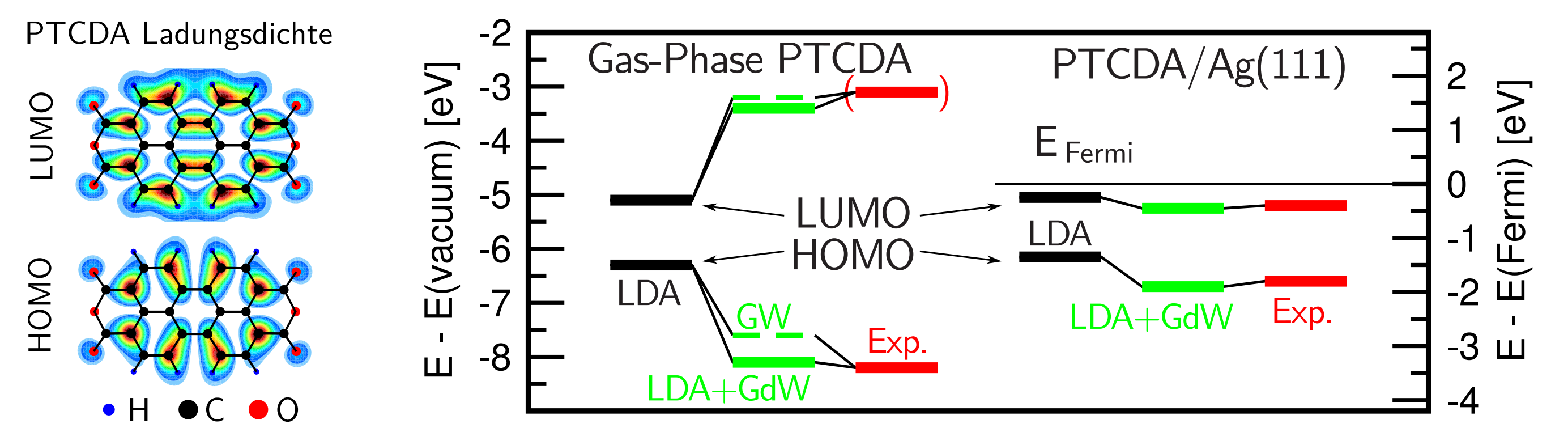
Aktuelle Bachelor-/Masterarbeit:

### Exzitonen in CrSBr bei externem Magnetfeld:

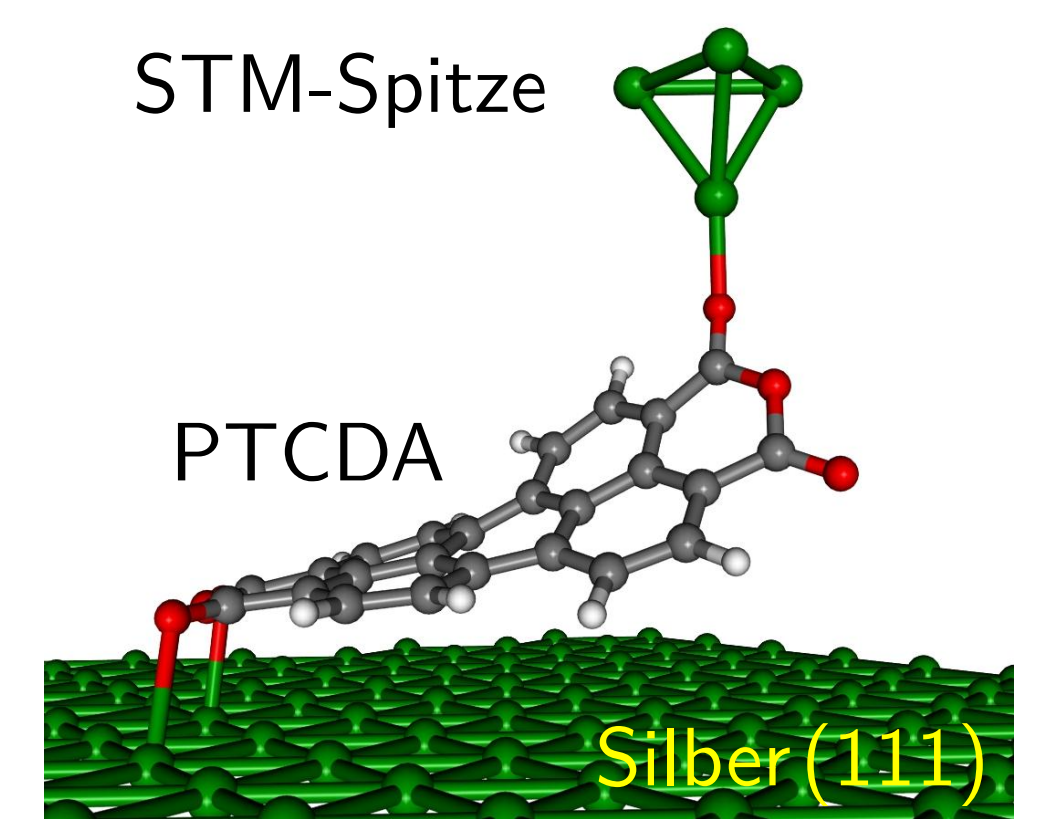
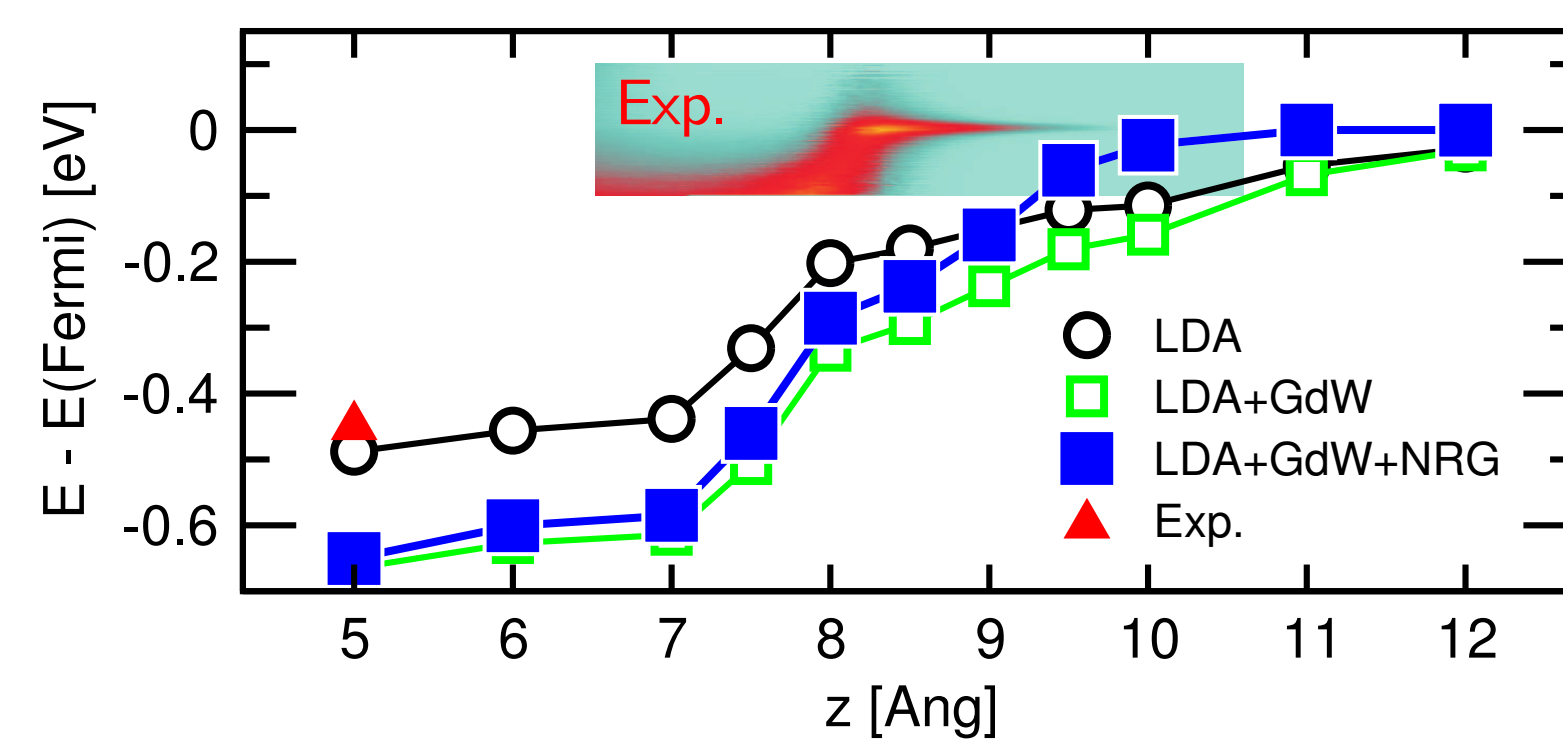
- Externes Magnetfeld dreht die Spin-Polarisation in den einzelnen Schichten
- Übergang von antiferro- zu ferromagnetischer Konfiguration
- Ziel: Beschreibung mit möglichst einfachem Modellhamiltonian, basierend auf *ab-initio* Daten (DFT, GW, BSE) für ausgewählte Konfigurationen

## Organische Moleküle auf Oberflächen

- Moleküle bilden endliche Anzahl von Bindungen aus ⇒ Zustände (Molekülorbitale) mit anderen Eigenschaften als im Atom
- 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)



⇒ Ungeahntes Potenzial für zukünftige (opto)elektronische Anwendungen (Lichtemission, Photovoltaik, molekulare Schalter, Sensoren, Einzelelektronen-Transistoren, Spintronik)

Aktuelle Bachelor-/Masterarbeit:

### Adsorbierte Monolage organischer Moleküle (z.B. Tetracene) auf MoS<sub>2</sub>:

- Adsorbatschicht und Substratmaterial haben unterschiedliche Gitterkonstante
- Welche großflächige Struktur? Musterbildung?
- Resultierende elektronische und optische Eigenschaften
- Methodik: Techniken der Molekulardynamik und Optimierung; DFT-basierte klassische Kraftfelder; *ab-initio* Vielteilchenstörungstheorie und deren Abbildung auf Modelle

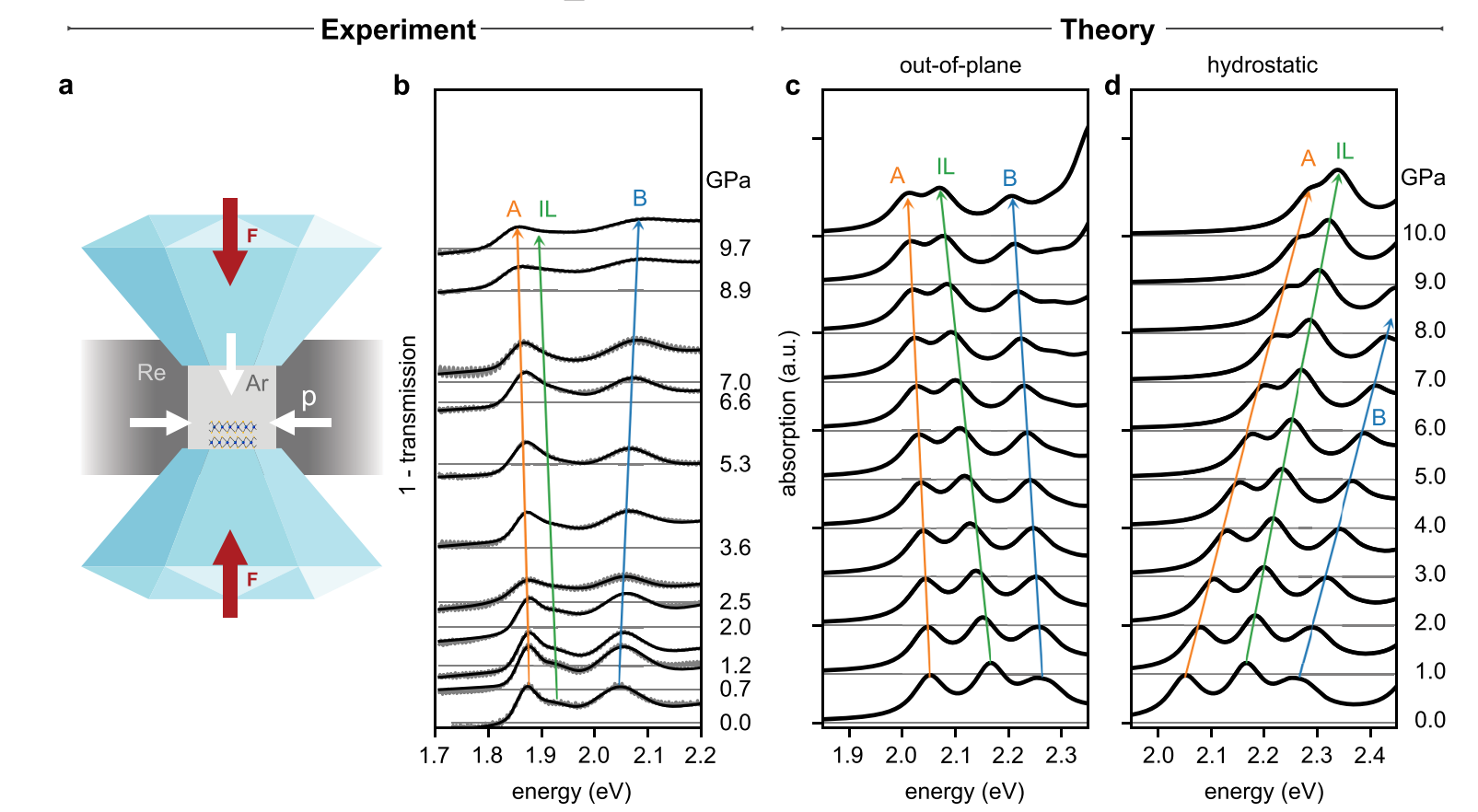
## Wechselwirkung Geometrie-Elektronen

Elektronen reagieren auf die geometrische Struktur des Festkörpers

### Manipulation optischer Übergänge durch angelegten Druck

- Druck ⇒ Verformung ⇒ Verschiebung der Energiebänder
  - auch: Modifikation der Elektron-Loch-Wechselwirkung
- ⇒ Energetische Verschiebung als Drucksensor

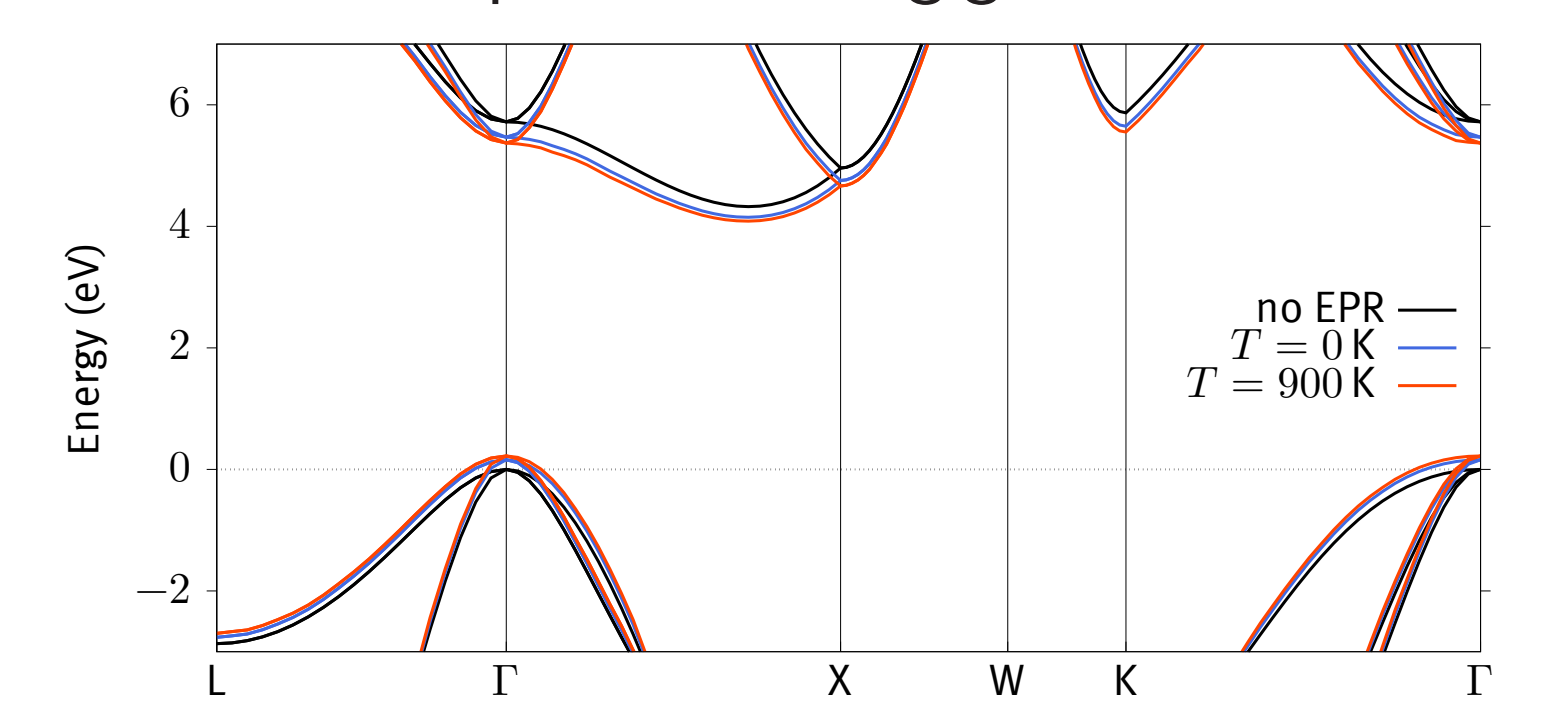
### Exzitonen in MoS<sub>2</sub> unter Druck:



### Quantenmechanische Wechselwirkung mit Gitterschwingungen

- Gekoppelte Schwingungen der Atome + Quantenmechanik ⇒ Phononen
  - Kopplung mit Elektronen ⇒ Verschiebungen elektronischer Energien
- ⇒ Änderungen als Temperatursensor

### Diamant: temperaturabhängige Bandstruktur:



Aktuelle Bachelor-/Masterarbeiten:

### Mechanik von MoS<sub>2</sub> mit klassischen mechanischen Potenzialen:

- Ab-initio* Energetik ⇒ Abbildung auf klassische Potenziale
- van der Waals Potenziale (z.B. Lennard-Jones) zwischen den Schichten
- Ziel: Verformung unter Druck, Phononendispersion, Biegeverhalten, ...

### Elektron-Phonon-Wechselwirkung von NTCDA auf Ag(111)

- Adsorbathöhe von NTCDA auf Ag(111) beeinflusst Energie des elektronischen Grenzflächen-Zustands ⇒ Elektron-Phonon-Wechselwirkungseffekte
- Beschreibung mit möglichst einfachem/analytischen Modell
- Temperaturabhängige Energieänderung und Lebensdauer des Zustands

## Themen einiger bisheriger Bachelor- und Masterarbeiten

- Van-der-Waals Wechselwirkung zwischen harmonischen Oszillatoren
- Modelluntersuchungen von Trionen: korrelierte Dreiteilchenzustände
- Elektronische Struktur von Dichalkogeniden
- Adsorbate auf Graphen und auf Metalloberflächen
- Exzitonen in Heterobilagen
- Elektron-Phonon Wechselwirkung in Gaußbasierter DFT
- Adsorption und Optik von Benzol auf MoS<sub>2</sub>

