

# Eine Reise von Bloch zu Wannier

## Kontext

Mit lokalisierten Orbitalen (Wannier-Funktionen) lassen sich nicht nur die Bindungen in Festkörpern und Molekülen charakterisieren, sie bieten auch das Potential computergestützte Berechnungen von Materialeigenschaften massiv zu beschleunigen. Dies ist von hoher Dringlichkeit, da akkurate Simulationen vieler relevanter Prozesse für Forschung und Industrie wegen des extrem hohen Rechenaufwands kaum durchführbar sind. Jeweils ausgehend von einem Satz delokalisierte Bloch-Funktionen (Eigenfunktionen eines Hamiltonians mit periodischem Potential), gibt es vielfältige Möglichkeiten einen Satz von lokalisierten Wannier-Funktionen zu konstruieren. Wie sollten Wannier-Funktionen für metallische, kovalente, oder ionische Systeme konstruiert werden? Antworten auf diese Fragen sind dringend erforderlich, denn sie entscheiden über ihren Nutzen als Turbo für hochgenaue Simulationen. Mangels effizienter Implementierungen ist jedoch für Festkörper bis heute kein systematischer Vergleich von Wannier-Funktionen möglich gewesen. Das soll sich mit diesem Projekt ändern.

## Ziel

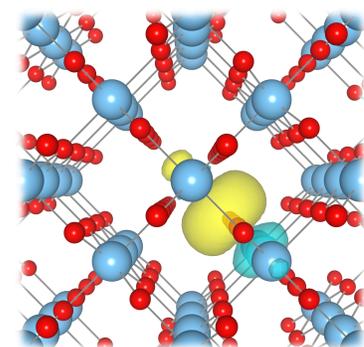
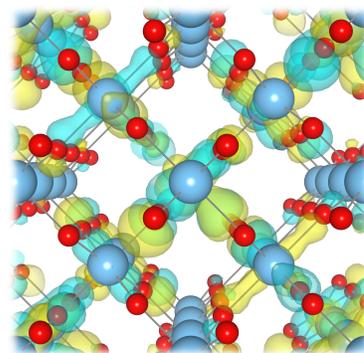
- Routinierter Umgang mit first-principle Software für Festkörper (VASP).
- Implementierung eines neuen hocheffizienten Algorithmus zur Berechnung von Wannier-Funktionen für Festkörper (BFGS solver, siehe Literatur).
- Anwendung auf unterschiedliche Bindungstypen.

## Voraussetzungen

- hohe Lernbereitschaft
- Grundkenntnisse in der Quantentheorie
- Grundkenntnisse in der Festkörpertheorie
- Grundkenntnisse in der Programmierung

## Literatur

- [en.wikipedia.org/wiki/Localized\\_molecular\\_orbitals](https://en.wikipedia.org/wiki/Localized_molecular_orbitals)
- "Surface science using coupled cluster theory via local Wannier functions", [doi.org/10.1063/5.0074936](https://doi.org/10.1063/5.0074936)
- BFGS solver: „Robust Pipek-Mezzey Orbital Localization in Periodic Solids“, [doi.org/10.1021/acs.jctc.1c00238](https://doi.org/10.1021/acs.jctc.1c00238)



*Kristallstruktur von Titanoxid  
oben: Bloch-Funktion  
unten: Wannier-Funktion*