

Ein neuer Hamiltonian für Graphen

Kontext

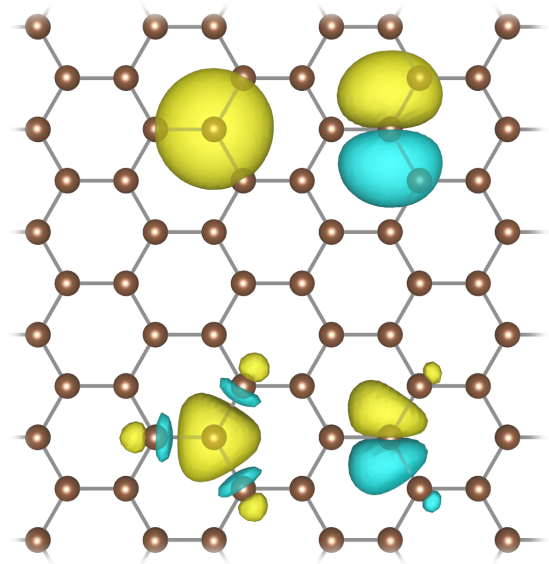
Design und Simulation von 2D-Heterostrukturen stellt ein rasant wachsendes Forschungsfeld in der Materialphysik dar. Dabei nimmt Graphen wegen seiner vielfältigen Eigenschaften eine herausragende Rolle ein. Eine realistische Modellierung kann beispielsweise durch sogenannten Tight-Binding-Hamiltonians ermöglicht werden. Als Basis werden dazu häufig Atomic Orbitals (AOs, Bild oben) verwendet. Diese haben jedoch den Nachteil, dass sie die Elektronendichte und damit auch die elektronischen Eigenschaften nur ungenügend repräsentieren können. Eine neue Technik, sogenannte Intrinsic Atomic Orbitals (IAOs, Bild unten), erlauben eine exakte Darstellung der Elektronendichte und bieten daher eine einfache und zugleich genauere Basis für Tight-Binding-Hamiltonians. In der Materialphysik fanden die IAOs bisher noch keine Anwendung und stellen einen neuen vielversprechenden Ansatz dar.

Ziel

- Routinierter Umgang mit first-principle Software für Festkörper (VASP).
- erstmalige Konstruktion von Tight-Binding-Hamiltonians in der IAO-Basis.
- Rekonstruktion der Graphene-Bandstruktur.
- Vergleich von AOs und IAOs (räumliche Ausdehnung, Wahrung der Gittersymmetrie, etc.).
- Simulation von Defekten in Graphen.

Voraussetzungen

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



Literatur

- "Intrinsic Atomic Orbitals: An Unbiased Bridge between Quantum Theory and Chemical Concepts", doi.org/10.1021/ct400687b
- en.wikipedia.org/wiki/Intrinsic_bond_orbitals
- "Accurate modeling of defects in graphene transport calculations", doi.org/10.1103/PhysRevB.97.035430