

Berechnung von Tight-Binding Parametern mit Dichtefunktionaltheorie am Beispiel von *trans*-Polyacetylen

Bachelor-Vortrag

Fabian Glatzel

Physikalisches Institut

19. Juli 2017

1 Einleitung

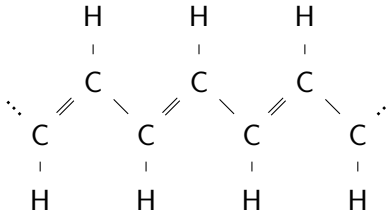
- Motivation
- Dichtefunktionaltheorie
- Dichtefunktionaltheorie mit Zwangsbedingungen

2 Ergebnisse

3 Zusammenfassung

Motivation

- Große Anwendungsbreite von organischen Halbleitern
- Polyacetylen als einfaches Testsystem
- 1950-er LONGUET-HIGGINS: Alternierende Bindungslängen
- 1980-er SU, SCHRIEFFER, HEEGER: Anregungen (Soliton)
- Gute Bandstruktur mit Tight-Binding



Dichtefunktionaltheorie

- Numerische, ab initio, Selbstkonsistenz-Methode zur Berechnung von quantenmechanischen Grundzuständen
- BORN-OPPENHEIMER-Näherung
- HOHENBERG-KOHN Theoreme:
Elektronendichte des Grundzustands bestimmt externes Potential eindeutig und damit Grundzustands-Wellenfunktion:

$$\Psi_0 = \Psi [n_0]$$

Die Grundzustandsdichte minimiert das Energie-Funktional:

$$E[n_0] \leq E[n]$$

- Nicht wechselwirkende Elektron-Wellenfunktionen φ_i (Kohn-Sham-Orbitale) mit selber Elektronendichte

$$n(\vec{r}) = \sum_i |\varphi_i|^2$$

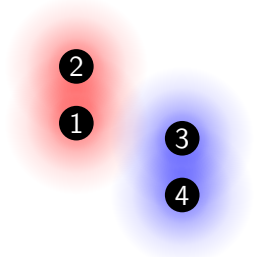
und Einteilchen-Hamiltonian:

$$\mathcal{H} = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V_{\text{eff}}(\vec{r}, n(\vec{r}))$$

- Unbekannte Terme in $V_{\text{eff}}(\vec{r}, n(\vec{r}))$: exchange-correlation-Term
Verwendete Approximation: PBE (GGA)
- Lösen mit Iteration und Test auf Selbstkonsistenz

Dichtefunktionaltheorie mit Zwangsbedingungen (cDFT)

- Manuelles Verschieben von Ladung mittels externen Potentialen
- Definiere i Regionen und Ladungen N_i
- Überlagerte Gauß-Kurven $w(\vec{r})$ zentriert an Kernpositionen \vec{R}_j
- Test



$$F[n(\vec{r}), U_i] = E_0[n(\vec{r})] + \sum_i U_i \left(\int d\vec{r} w_i(\vec{r}) n(\vec{r}) - N_i \right)$$

- Test

$$0 = \int d\vec{r} w_i(\vec{r}) n(\vec{r}) - N_i$$

title