

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

Bachelor-Vortrag

Fabian Glatzel

Physikalisches Institut

19. Juli 2017

## 1 Einleitung

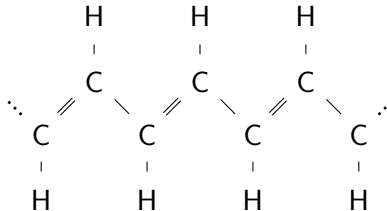
- Motivation
- Dichtefunktionaltheorie
- Constrained Density Functional Theory

## 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  $\varphi_i$  (Kohn-Sham-Orbitale) mit selber Elektronendichte

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

und Einteilchen-Hamiltonian:

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



# title