

# Elektronische Struktur von funktionalisierten Graphen@Gruppe IV/SiC Grenzflächen.

Bachelor- oder Masterprojekt in der Gruppe für  
Computational Condensed Matter Theory – Prof. Wehling

Zuletzt kompiliert: 30. September 2022

## System

Zweidimensionale Materialien bieten aufgrund der reduzierten Dimensionalität einzigartige Eigenschaften und sie beherbergen besondere Materiezustände, die für die technische Anwendung maßgeschneidert werden können. Ausgehend von Graphen – eine dünne Schicht aus Kohlenstoffatomen, die in einem Honigwabengitter angeordnet sind – sind sogenannte Heterostrukturen, in denen unterschiedliche zweidimensionale Materialien gestapelt werden, aufgrund ihrer Flexibilität in der Anpassung der Materialeigenschaften in das Licht aktueller Forschung gerückt.

In diesem Abschlussprojekt untersuchen Sie Heterostrukturen, die aus Graphenmonolagen auf SiC Substraten mit einer interkalierten Schicht aus Gruppe IV Atomen (C, Si, Ge, Sn, Pb) bestehen. Das Zusammenspiel von Zwischenschicht und Graphen führt zu unterschiedlichen Hybridisierungseffekten in der elektronischen Bandstruktur und ermöglicht es, die Stärke von elektronischen Korrelationseffekten zu verändern.

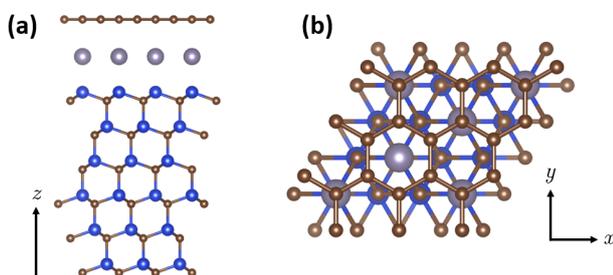


Abbildung 1: Schematische Darstellung der Graphen@Gruppe IV/SiC Heterostrukturen. Zuordnung der Atomfarben: Kohlenstoff = braun, Silizium = blau, Gruppe IV Zwischenschicht = grau. (a) Seitenansicht. (b) Draufsicht.

## Methodik

Das Ziel der Arbeit ist die Charakterisierung der elektronischen Bandstruktur von verschiedenen Graphen@Gruppe IV Grenzflächen. Sie werden mithilfe von Dichtefunktionaltheorie (DFT) den Einfluss der Atomdichte der interkalierten Lage und der Positionierung von Graphen auf die Bandstruktur untersuchen.

Zusätzlich werden Sie die Tight-Binding Methode verwenden, um ein effektives Modell der Bandstruktur aufzustellen. Mit diesem könne die mikroskopischen Ursprünge von Eigenschaften und Korrelationseffekte untersucht werden. Die Ergebnisse werden zur Erklärung von experimentellen Messungen und zur Unterstützung für zukünftige Experimente genutzt.

## Lernziele und Vorkenntnisse

Im Rahmen des Projekts werden Sie **Dichtefunktionaltheorie** und **Tight-Binding Modellierung** für die Beschreibung elektronischer Bandstrukturen kennenlernen. Zusätzlich erlernen Sie den Umgang mit **Hochleistungsrechnern** und das **Programmieren für Datenverarbeitung und -visualisierung**. Sie arbeiten dabei in einem internationalem Arbeitsumfeld mit aktiver Kollaboration mit experimentellen Arbeitsgruppen.

Gute Kenntnis in **Quantenmechanik** und Grundkenntnisse in **Festkörperphysik** sind hilfreich für das erfolgreiche Bearbeiten des Projekts.

Bei Interesse melden Sie sich gerne bei Niklas Witt und Prof. Tim Wehling:  
niklas.witt@physik.uni-hamburg.de  
tim.wehling@uni-hamburg.de