

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	11
1.1. Motivation	11
I. Grundlagen	13
2. Theorie	15
2.1. Überblick	15
2.2. Vielteilchensysteme	17
2.2.1. Der Hamiltonoperator	17
2.2.2. Die Born-Oppenheimer-Näherung	17
2.2.3. Dichtefunktionaltheorie	18
2.2.3.1. Die lokale Näherung der Dichtefunktionaltheorie	21
2.2.4. Spindichtefunktionaltheorie	22
2.3. LMTO	24
2.3.1. Die Muffin-Tin-ASA-Geometrie	24
2.3.2. Muffin-Tin-Orbitale	27
2.3.3. Linearisierung der Potentialfunktion $P_{\ell}(E)$	29
2.4. Greensche Funktionen	33
2.4.1. Die Dyson-Gleichung	35
2.4.2. Anwendung auf das Störstellenproblem	36
2.4.3. Die Integrationswege	37
2.5. Bestimmung der Gesamtenergie	38
2.5.1. Das Umladungsniveau	39
2.6. Die Hyperfeinwechselwirkung	41

II. Ergebnisse	45
3. Die Bandstruktur der II-VI-Halbleiter	47
4. Störstellen mit A_1-Grundzustand	51
4.1. Gitterfehlstellen	51
4.1.1. Das Defektmolekül-Modell	51
4.1.2. Die Schwefel-Fehlstelle in Zinksulfid	55
4.1.3. Die Tellur-Fehlstelle in Cadmiumtellurid	60
4.1.4. Die Selen-Fehlstelle in Zinkselenid	64
4.1.5. Die Tellur-Fehlstelle in Zinktellurid	65
4.2. Störstellen im Zwischengitter	66
4.2.1. Die Zink-Zwischengitterstörstelle in Zinkselenid	66
4.3. Donatoren aus der Gruppe IV	72
4.3.1. Beispiel: Germanium in Cadmiumtellurid	73
4.3.2. Hyperfeinwechselwirkungen und Umladungsenergien	77
5. Kation-Fehlstellen	81
5.1. Die Zink-Fehlstelle in Zinkselenid	81
5.1.1. Untersuchung der Zink-Fehlstelle in C_{3v} -Symmetrie	86
5.2. Die Cadmium-Fehlstelle in Cadmiumtellurid	90
6. Substitutionelle $3d$-Übergangsmetalle	95
6.1. Das Ludwig-Woodbury-Modell	95
6.2. Ergebnisse	97
6.2.1. Scandium	97
6.2.2. Titan	97
6.2.3. Vanadium	105
6.2.4. Chrom	106
6.2.5. Mangan	109
6.2.6. Eisen	112
6.2.7. Sonstige $3d$ -Übergangsmetall-Störstellen	114
6.3. Zusammenfassung der Ergebnisse	114

7. Fazit und Ausblick	115
A. g_n-Faktoren	117

Abbildungsverzeichnis

2.1. Schematische Darstellung des verwendeten Rechenverfahrens	16
2.2. Das Muffin-Tin-Potential	24
2.3. Kugelmodell der Zinkblendestruktur	25
2.4. Die Gitterpositionen der Zinkblendestruktur	26
2.5. Die verwendeten Integrationswege	37
2.6. Bestimmung eines Umladungsniveaus	40
3.1. Die Bandstruktur des Cadmiumtellurid	47
3.2. Die Bandstruktur des Silizium	48
3.3. Die Zustandsdichte der Valenzelektronen in CdTe	49
3.4. Die Zustandsdichte der Valenzelektronen in CdTe, zerlegt nach irreduziblen Darstellungen der Tetraedergruppe	50
4.1. Das Defektmolekül-Modell	52
4.2. Aufspaltung der Einteilchenzustände im Defektmolekül-Modell der Fehlstelle	53
4.3. Aufspaltung der Einteilchenzustände einer Fehlstelle unter Berücksichtigung der Spin-Austausch-Wechselwirkung	53
4.4. Aufspaltung der Einteilchenzustände der neutralen Anion-Fehlstelle	54
4.5. Aufspaltung der Einteilchenzustände der neutralen Kation-Fehlstelle	54
4.6. Die Geometrie der Anion-Fehlstelle	55
4.7. Induzierte a_1 -Zustandsdichte der positiv geladenen Schwefel-Fehlstelle in Zinksulfid	56
4.8. Induzierte t_2 -Zustandsdichte der positiv geladenen Schwefel-Fehlstelle in Zinksulfid	57
4.9. In der Bandlücke induzierte Magnetisierungsdichte der Schwefel-Fehlstelle in Zinksulfid	58

4.10. In den Valenzbändern induzierte Magnetisierungsdichte der Schwefel-Fehlstelle in Zinksulfid	59
4.11. Gesamte induzierte Teilchendichte der Schwefel-Fehlstelle in Zinksulfid	60
4.12. Induzierte α_1 -Zustandsdichte der Tellur-Fehlstelle in Cadmiumtellurid	62
4.13. Induzierte t_2 -Zustandsdichte der Tellur-Fehlstelle in Cadmiumtellurid	62
4.14. In der Bandlücke induzierte Magnetisierungsdichte der Tellur-Fehlstelle in Cadmiumtellurid	63
4.15. In den Valenzbändern induzierte Magnetisierungsdichte der Tellur-Fehlstelle in Cadmiumtellurid	63
4.16. Gesamte induzierte Teilchendichte der Tellur-Fehlstelle in Cadmiumtellurid	64
4.17. Die Geometrie der Zink-Zwischengitterstörstelle in Zinkselenid	66
4.18. Qualitative Erklärung der Bindung der Zink-Zwischengitterstörstelle	67
4.19. In der Bandlücke induzierte Magnetisierungsdichte der Zink-Zwischengitterstörstelle in Zinkselenid	68
4.20. In den Valenzbändern induzierte Magnetisierungsdichte der Zink-Zwischengitterstörstelle in Zinkselenid	69
4.21. Gesamte induzierte Teilchendichte der Zink-Zwischengitterstörstelle in Zinkselenid	70
4.22. Induzierte a_1 -Zustandsdichte der Zink-Zwischengitterstörstelle in Zinkselenid	70
4.23. Induzierte e -Zustandsdichte der Zink-Zwischengitterstörstelle in Zinkselenid	71
4.24. Induzierte t_2 -Zustandsdichte der Zink-Zwischengitterstörstelle in Zinkselenid	71
4.25. Die Geometrie der substitutionellen Kation-Störstelle	72
4.26. Kovalentes Bindungs-Modell	73
4.27. Induzierte α_1 -Zustandsdichte für Germanium in Cadmiumtellurid	74
4.28. Induzierte t_2 -Zustandsdichte für Germanium in Cadmiumtellurid	75
4.29. In der Bandlücke induzierte Magnetisierungsdichte der Germanium-Störstelle in Cadmiumtellurid	75
4.30. In den Valenzbändern induzierte Magnetisierungsdichte der Germanium-Störstelle in Cadmiumtellurid	76
4.31. Gesamte induzierte Teilchendichte der Germanium-Störstelle in Cadmiumtellurid	76
5.1. Die Geometrie der Kation-Fehlstelle	81
5.2. Induzierte α_1 -Zustandsdichte der Zink-Fehlstelle in Zinkselenid	82

5.3. Induzierte t_2 -Zustandsdichte der Zink-Fehlstelle in Zinkselenid	83
5.4. In der Bandlücke induzierte Magnetisierungsdichte der Zink-Fehlstelle in Zinkselenid	84
5.5. In den Valenzbändern induzierte Magnetisierungsdichte der Zink-Fehlstelle in Zinkselenid	85
5.6. Gesamte induzierte Teilchendichte der Zink-Fehlstelle in Zinkselenid	85
5.7. Aufspaltung der Einteilchenzustände der Kation-Fehlstelle in C_{3V} -Symmetrie	86
5.8. Induzierte a_1 -Zustandsdichte der Zink-Fehlstelle in C_{3V} -Symmetrie	88
5.9. Induzierte e -Zustandsdichte der Zink-Fehlstelle in C_{3V} -Symmetrie	88
5.10. In der Bandlücke induzierte a_1 -Magnetisierungsdichte der Zink-Fehlstelle in C_{3V} -Symmetrie	89
5.11. In der Bandlücke induzierte e -Teilchendichte der Zink-Fehlstelle in C_{3V} -Symmetrie	89
5.12. Induzierte a_1 -Zustandsdichte der Cadmium-Fehlstelle in Cadmiumtellurid	91
5.13. Induzierte t_2 -Zustandsdichte der Cadmium-Fehlstelle in Cadmiumtellurid	91
5.14. In der Bandlücke induzierte Magnetisierungsdichte der Cadmium-Fehlstelle in Cadmiumtellurid	92
5.15. In den Valenzbändern induzierte Magnetisierungsdichte der Cadmium-Fehlstelle in Cadmiumtellurid	92
5.16. Gesamte induzierte Teilchendichte der Cadmium-Fehlstelle in Cadmiumtellurid	93
6.1. Schematische Aufspaltung der Einteilchenzustände für ein $3d$ -Übergangsmetall nach dem Ludwig-Woodbury-Modell	96
6.2. Simuliertes EPR-Spektrum der Ti^{2+} -Störstelle in Cadmiumtellurid	99
6.3. Induzierte a_1^\dagger -Zustandsdichte der Ti^{3+} -Störstelle in Cadmiumtellurid	101
6.4. Induzierte a_1^\dagger -Zustandsdichte der Ti^{3+} -Störstelle in Cadmiumtellurid	101
6.5. Induzierte e^\dagger -Zustandsdichte der Ti^{3+} -Störstelle in Cadmiumtellurid	102
6.6. Induzierte e^\dagger -Zustandsdichte der Ti^{3+} -Störstelle in Cadmiumtellurid	102
6.7. Induzierte t_2^\dagger -Zustandsdichte der Ti^{3+} -Störstelle in Cadmiumtellurid	103
6.8. Induzierte t_2^\dagger -Zustandsdichte der Ti^{3+} -Störstelle in Cadmiumtellurid	103
6.9. In der Bandlücke induzierte Magnetisierungsdichte der Ti^{3+} -Störstelle in Cadmiumtellurid	104
6.10. In den Valenzbändern induzierte Magnetisierungsdichte der Ti^{3+} -Störstelle in Cadmiumtellurid	104

6.11. Gesamte induzierte Teilchendichte der Ti^{3+} -Störstelle in Cadmiumtellurid . . .	105
6.12. Einteilchen-Niveaus der Chrom-Störstelle in Cadmiumtellurid	107
6.13. In der Bandlücke induzierte Magnetisierungsdichte der Cr^{+} -Störstelle in Cadmiumtellurid	108
6.14. In den Valenzbändern induzierte Magnetisierungsdichte der Cr^{+} -Störstelle in Cadmiumtellurid	108
6.15. Gesamte induzierte Teilchendichte der Cr^{+} -Störstelle in Cadmiumtellurid . . .	109
6.16. In der Bandlücke induzierte Magnetisierungsdichte der Mn^{2+} -Störstelle in Cadmiumtellurid	110
6.17. In den Valenzbändern induzierte Magnetisierungsdichte der Mn^{2+} -Störstelle in Cadmiumtellurid	111
6.18. Gesamte induzierte Teilchendichte der Mn^{2+} -Störstelle in Cadmiumtellurid . .	111
6.19. In den Valenzbändern induzierte Magnetisierungsdichte der Fe^{3+} -Störstelle in Cadmiumtellurid	113
6.20. Gesamte induzierte Teilchendichte der Fe^{3+} -Störstelle in Cadmiumtellurid . . .	113
A.1. Das Periodensystem der Elemente	118