

# Inhaltsverzeichnis

<b>Inhaltsverzeichnis</b>	<b>v</b>
<b>Abbildungsverzeichnis</b>	<b>vii</b>
<b>Tabellenverzeichnis</b>	<b>ix</b>
<b>1 Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2 Vielteilchensysteme und DFT</b>	<b>5</b>
2.1 Die Grundidee der Dichtefunktionaltheorie . . . . .	5
2.2 Die klassische DFT . . . . .	6
2.3 Relativistische Formulierung der DFT . . . . .	9
2.3.1 Hyperfeinwechselwirkung . . . . .	9
2.3.2 Spindichtefunktionalformalismus . . . . .	11
<b>3 Das erweiterte LMTO-ASA-Verfahren</b>	<b>13</b>
3.1 Die Grundidee des LMTO-Verfahrens . . . . .	15
3.2 „Atomic Spheres Approximation“ (ASA) . . . . .	17
3.3 LMTO und Greensche Funktionen — Dysongleichung . . . . .	20
3.4 Madelung-Analyse der Coulomb-Wechselwirkung . . . . .	21
<b>4 3C-SiC als ideales Testsystem</b>	<b>25</b>
4.1 Die Silizium-Vakanz $V_{Si}$ in 3C-SiC . . . . .	25
4.2 Das modifizierte Hybridisierungsmodell . . . . .	30
4.3 Zur Genauigkeit der Gesamtenergie . . . . .	37
<b>5 Diamant</b>	<b>43</b>
5.1 Die isolierte Vakanz in Diamant . . . . .	44
5.1.1 Einschub — der substitutionelle Ni-Defekt . . . . .	49
5.1.2 Analyse der Hyperfeinparameter — Anwendung der Hybridisierungsmodelle . . . . .	51

5.1.3	Anregungsenergien in LSDA-DFT . . . . .	55
5.1.4	„Configuration Interaction“ (CI) — eine qualitative Betrachtung	58
5.1.5	Betrachtung von Jahn-Teller-Verzerrungen . . . . .	61
5.2	Stickstoff-Vakanz-Komplexe . . . . .	67
5.2.1	Anregungsmechanismus der H <sub>2</sub> /H <sub>3</sub> -ZPL — qualitativer Einfluß von Konfigurationswechselwirkungen (CI)	77
<b>6</b>	<b>Die Vakanz in Silizium</b>	<b>83</b>
6.1	Der positive Ladungszustand: V <sub>Si</sub> <sup>+</sup> . . . . .	84
6.2	Die negative Vakanz in Silizium als „High End“-Problem . . . . .	87
6.2.1	Erster Versuch einer spinpolarisierten Rechnung: LMTO-ASA	89
6.2.2	Zweiter Versuch einer spinpolarisierten Rechnung: DFTB + LMTO-ASA . . . . .	93
<b>7</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>97</b>
<b>A</b>	<b>Der allgemeine KKR-MTO-Formalismus</b>	<b>99</b>
A.1	Einführung der KKR-Muffin-Tin-Orbitale . . . . .	99
A.2	Von der Kompensationsbedingung zur Säkulargleichung . . . . .	102
A.3	Mehrzentrenentwicklung der Muffin-Tin-Orbitale: . . . . .	104
A.4	Der ASA-Formalismus im ( $\kappa^2 \rightarrow 0$ )-Limes . . . . .	105
<b>B</b>	<b>Gesamtenergien im LMTO-Formalismus</b>	<b>107</b>
B.0.1	Madelung-Analyse der Coulomb-Wechselwirkung . . . . .	110
<b>C</b>	<b>Greensche Funktionen</b>	<b>113</b>
C.1	Definition und Informationsgehalt . . . . .	113
C.2	Entwicklung von G <sup>0</sup> nach Kugelflächenfunktionen — Umnormierte sphärische Besselfunktionen . . . . .	116
<b>D</b>	<b>Quantenmechanik in endlichen Volumina</b>	<b>118</b>
D.1	Energieabhängigkeit der Basisfunktionen . . . . .	118
D.2	(Nicht-)Hermitizität des Hamilton-Operators . . . . .	118
D.3	Reellwertigkeit von Eigenfunktionen . . . . .	119
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>121</b>
	<b>Danksagung</b>	<b>131</b>

# Abbildungsverzeichnis

2.1	Bandstruktur und projizierte Zustandsdichte von Diamant . . . . .	8
3.1	Veranschaulichung eines Muffin-Tin-Potentials . . . . .	15
3.2	Voronoi-Zellen-Einteilung einer ungeordneten Struktur . . . . .	18
3.3	Aufnahme der Territorien von Maulbrüterfischen . . . . .	19
4.1	Freie Orbitale ( <i>dangling bonds</i> ) der Vakanz im Defektmolekül-Modell	26
4.2	Aufspaltung der Einteilchenzustände einer Vakanz in $T_d$ -Symmetrie	27
4.3	Ligandenrelaxation geladener Vakanz in 3C-SiC . . . . .	28
4.4	Veranschaulichung des Hybridisierungsmodells . . . . .	31
4.5	HFI-Quotient $b/a$ der Si-Vakanz in 3C-SiC . . . . .	33
4.6	Gültigkeitsbereich des Hybridisierungsmodells . . . . .	34
4.7	HFI-Quotient $b/a$ (modifiziert) der Si-Vakanz in 3C-SiC . . . . .	36
4.8	Induzierte Teilchendichten der Antisites in 3C-SiC . . . . .	38
4.9	Gesamtenergiekurve für $V_{Si}^-$ und $Si_C$ in 3C-SiC . . . . .	39
5.1	Ligandenrelaxation geladener Vakanz in Diamant . . . . .	44
5.2	Gesamtenergiekurven von $V^0$ und $V^-$ in Diamant . . . . .	45
5.3	LSDA-Konfigurationen von $V^0$ und $V^-$ in Diamant (CI) . . . . .	46
5.4	Magnetisierungsdichte von $V^-$ und $Ni_C^-$ in Diamant . . . . .	49
5.5	Magnetisierungsdichte eines Kohlenstoff- <i>dangling bonds</i> . . . . .	50
5.6	HFI-Quotient $b/a$ von Vakanz in Diamant . . . . .	51
5.7	Anregungsmechanismus der Vakanz in Diamant . . . . .	56
5.8	CI für geladene Vakanz — das Modell von Coulson und Kearsley .	58
5.9	Jahn-Teller-Effekt bei der Vakanz im Einteilchenmodell . . . . .	61
5.10	Gesamtenergiehyperflächen für $V^0$ in Diamant in $D_{2d}$ -Symmetrie . .	65
5.11	Gesamtenergiehyperfläche für $V_{Si}^0$ in 3C-SiC in $D_{2d}$ -Symmetrie . . . .	66
5.12	Absorptionsspektrum eines HPHT-Diamanten . . . . .	71
5.13	Defektgeometrien der H3- und H4-Zentren in Diamant . . . . .	72

5.14	Die H2-/H3-ZPL im Einteilchenmodell ( $C_{2v}$ -Symmetrie) . . . . .	73
5.15	Dichteverteilung und Knotenebene des $b_1$ -Orbitals . . . . .	74
5.16	Magnetisierungsdichte angeregter H3-/H4-Zentren in Diamant . . . . .	76
5.17	CI bei der H3-ZPL in Diamant . . . . .	78
6.1	$V_{Si}^+$ in Silizium: Abhängigkeit der HFI von der Ligandenrelaxation . . . . .	84
6.2	HFI-Quotient $b/a$ für $V_{Si}^+$ in Silizium . . . . .	85
6.3	Jahn-Teller-Effekt für $V_{Si}^-$ im Einteilchenmodell . . . . .	87
6.4	CI beim $^3B_1$ -Grundzustand der $V_{Si}^-$ in Silizium . . . . .	88
6.5	LDA-„Magnetisierungsdichte“ und LSDA-Magnetisierungsdichte . . . . .	90
6.6	Spindichte der negativen Vakanz in Silizium . . . . .	95
A.1	Skizze zur Mehrzentrenentwicklung der Muffin-Tin-Orbitale . . . . .	104
C.1	Die sphärische Besselfunktionen und Neumannfunktionen . . . . .	116

# Tabellenverzeichnis

3.1	Bildungsenergien diverser (Di-)Vakanzen . . . . .	14
3.2	Energielücken, Gitterkonstanten und Kompressionsmoduli . . . . .	23
4.1	Hyperfeinwechselwirkung (HFI) der Si-Vakanz in 3C-SiC . . . . .	29
4.2	Umladungsniveaus der Si-Vakanz in 3C-SiC . . . . .	40
5.1	Liganden-HFI (5 Schalen) diverser Defekte in Diamant und SiC . . . . .	48
5.2	HFI in Diamant: Einfluß der Gitterkonstanten und gewählter Basis . . . . .	53
5.3	Umladungsniveaus und HFI geladener Vakanzen in Diamant . . . . .	54
5.4	Jahn-Teller-Verzerrung geladener Vakanzen in Diamant . . . . .	62
5.5	Umladungsniveaus ausgewählter Stickstoff-Vakanz-Komplexe . . . . .	68
5.6	Anregungsenergien verschiedener Farbzentren in Diamant . . . . .	70
5.7	Energieabsenkung durch Stickstoff-Vakanz-Austauschprozesse . . . . .	72
5.8	HFI diverser Farbzentren in Diamant . . . . .	80
6.1	Liganden-HFI der negativen Vakanz in Silizium . . . . .	91
6.2	Zur Konvergenz der berechneten Ligandenabstände . . . . .	92