

Inhaltsverzeichnis

Inhaltsverzeichnis	v
Abbildungsverzeichnis	vii
Tabellenverzeichnis	ix
1 Einleitung	1
2 Vielteilchensysteme und DFT	5
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
3 Das erweiterte LMTO-ASA-Verfahren	13
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
4 3C-SiC als ideales Testsystem	25
4.1 Die Silizium-Vakanz V_{Si} in 3C-SiC	25
4.2 Das modifizierte Hybridisierungsmodell	30
4.3 Zur Genauigkeit der Gesamtenergie	37
5 Diamant	43
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 ₂ /H ₃ -ZPL — qualitativer Einfluß von Konfigurationswechselwirkungen (CI)	77
6	Die Vakanz in Silizium	83
6.1	Der positive Ladungszustand: V _{Si} ⁺	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
7	Zusammenfassung und Ausblick	97
A	Der allgemeine KKR-MTO-Formalismus	99
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	Gesamtenergien im LMTO-Formalismus	107
B.0.1	Madelung-Analyse der Coulomb-Wechselwirkung	110
C	Greensche Funktionen	113
C.1	Definition und Informationsgehalt	113
C.2	Entwicklung von G ⁰ nach Kugelflächenfunktionen — Umnormierte sphärische Besselfunktionen	116
D	Quantenmechanik in endlichen Volumina	118
D.1	Energieabhängigkeit der Basisfunktionen	118
D.2	(Nicht-)Hermitizität des Hamilton-Operators	118
D.3	Reellwertigkeit von Eigenfunktionen	119
	Literaturverzeichnis	121
	Danksagung	131

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