

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	5
1 Grundlagen	10
1.1 Zinkblende- und Diamantstruktur	10
1.2 Adiabatische Näherung	12
1.3 Kraftkonstanten und dynamische Matrix	12
1.4 Langreichweitige Kräfte	14
2 Raman-Effekt	16
2.1 Grundlagen	16
2.2 Raman-Intensität	18
2.2.1 Streuquerschnitt	19
2.2.2 Störoperator	20
2.2.3 Multi-Phonon-Entwicklung	22
2.2.4 Faust-Henry-Koeffizienten	23
2.2.5 Resonanz-Raman-Effekt	25
2.3 Symmetrie	26
3 Dichte-Funktional-Theorie und Dichte-Funktional-Störungstheorie	28
3.1 Dichte-Funktional-Theorie	29
3.1.1 Hohenberg-Kohn-Theorem	29
3.1.2 Kohn-Sham-Gleichungen	30

3.1.3	Lokale-Dichte-Näherung (LDA)	31
3.1.4	Entwicklung nach ebenen Wellen	32
3.1.5	Pseudopotentiale	33
3.1.6	Nichtlineare Rumpfkorrekturen (NLCC)	34
3.1.7	Spezielle Punkte	34
3.2	Dichte-Funktional-Störungstheorie	35
3.2.1	Lineare-Antwort-Theorie	35
3.2.2	Projektor-Methode	37
3.2.3	Polarisation, Bornsche effektive Ladung, Dielektrizitätskonstante und dynamische Matrix	37
3.2.4	$(2n + 1)$ -Theorem	40
4	Druckabhängigkeit der Raman-Spektren	42
4.1	Überblick	42
4.2	Konvergenzverhalten des Raman-Tensors	46
4.3	Elementhalbleiter	49
4.4	III-V-Halbleiter	52
4.5	Druckabhängigkeit der Grüneisen-Parameter	56
5	Theoretischer Zugang zu gemischten Halbleitersystemen	61
5.1	<i>Virtual-Crystal Approximation</i>	61
5.2	<i>Coherent-Potential Approximation</i>	62
5.3	Superzellenmethode und Massennäherung	64
6	Isotopenlegierungen	66
6.1	Ein-Phonon-Zustandsdichte	66
6.2	Frequenzverschiebungen	68
6.3	Raman-Spektren	73
7	Kraftkonstanten höherer Ordnung	76

7.1	Grenzen der CPA	76
7.2	Grundzustandsenergie gemischter Systeme	78
7.3	Bestimmung der Parameter	81
7.4	Kubische Anharmonizitäten	85
7.5	Anwendung auf Bulk-Halbleiter	88
8	Raman-Tensoren in Mischsystemen	94
8.1	Vorgehensweise	94
8.2	Entwicklung nach chemischen Variablen	95
8.3	Entwicklung nach Auslenkungen	99
8.4	Entwicklung nach Verzerrungen	101
8.5	Raman-Tensoren für Bulk-Materialien	102
8.6	Vernachlässigung der Faust-Henry-Koeffizienten in polaren Materialien	103
9	Raman-Spektren von Legierungen	105
9.1	Ein-Phonon-Zustandsdichten	105
9.1.1	$\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$	105
9.1.2	$\text{GaAs}_x\text{P}_{1-x}$	108
9.1.3	$\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{Sb}$	110
9.2	Raman-Intensitäten	111
9.2.1	$\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$	111
9.2.2	$\text{GaAs}_x\text{P}_{1-x}$	114
9.2.3	$\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{Sb}$	117
9.2.4	$\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{P}$	119
9.2.5	$\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{P}$	121
9.2.6	$\text{InAs}_x\text{P}_{1-x}$	122
10	Raman-Spektren von Übergittern	124
10.1	Si_nGe_n in (001)-Richtung	124

10.2	$(\text{GaSb})_n(\text{AlSb})_n$ in (001)-Richtung	125
11	Mischsysteme von GaN und AlN in Wurtzitstruktur	131
11.1	Bulk GaN und AlN in Wurtzitstruktur	132
11.2	Isotopeneffekte in GaN	136
11.3	Gitterdynamik von $2\text{H-Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{N}$	137
11.3.1	Schwierigkeiten bei der Analyse der Gitterdynamik	137
11.3.2	Gemischte Kraftkonstanten	140
11.3.3	Raman-Spektren	141
	Zusammenfassung und Ausblick	145
A	Raumgruppen der untersuchten Strukturen	148
A.1	Zinkblendestruktur (T_d)	148
A.2	Wurtzitstruktur (C_{6v}^4)	151
B	Kanzaki-Kräfte	153
C	Kubische Anharmonizitäten in der Zinkblendestruktur	156
C.1	Kubische Kraftkonstanten	156
C.2	Kanzaki-Kraftkonstanten	157
D	Raman-Tensoren	159
D.1	Bestimmung der $\mathcal{T}_{\alpha\beta\gamma} \begin{pmatrix} 1 \\ \kappa \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1' \\ \kappa' \end{pmatrix}$	159
D.2	Bestimmung der $\mathcal{P}_{\alpha\beta\gamma\delta} \begin{pmatrix} 1 \\ \kappa \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1' \\ \kappa' \end{pmatrix}$	161
	Literaturverzeichnis	171
	Dank	182