

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	1
1 Gitterdynamischer Formalismus	5
1.1 Gitterpotential und Kraftkonstanten	5
1.1.1 Definition der Kraftkonstanten	6
1.1.2 Invarianzeigenschaften der Kraftkonstanten	7
1.2 Harmonische Gitterdynamik	10
1.3 Anharmonische Störungstheorie	11
1.3.1 Kopplungskoeffizienten in Impulsraumdarstellung	12
1.3.2 Thermodynamische Störungstheorie	14
2 Ab-initio-Gitterdynamik	17
2.1 Adiabatische Näherung	17
2.2 Dichtefunktional-Theorie	19
2.3 Dichtefunktional-Störungstheorie	23
2.3.1 Koeffizienten zweiter Ordnung	23
2.3.2 Koeffizienten dritter Ordnung	26
3 Berechnung kubischer Kraftkonstanten	29
3.1 Berechnung der Kopplungstensoren	29
3.2 Ortsraumanalyse	32
3.2.1 Kopplungstensoren und Kraftkonstanten	32
3.2.2 Symmetriereduktion der Kraftkonstanten	34
3.2.3 Auswertung der Kopplungstensoren	36
4 Anharmonische Effekte	39
4.1 Grüneisen-Tensor und Internal-Strain	39
4.2 Thermische Ausdehnung	59

5 EXAFS-Kumulanten atomarer Verteilungsfunktionen	65
5.1 Definition der Kumulanten	66
5.2 EXAFS und Kumulanten	67
5.3 Kumulanten und Gitterdynamik	70
5.3.1 Darstellung durch Korrelationsfunktionen	70
5.3.2 Harmonische Korrelationsfunktionen	74
5.3.3 Anharmonische Korrelationsfunktionen	79
5.4 Berechnung der Kumulanten	93
5.4.1 Auswertung der gitterdynamischen Theorie	93
5.4.2 Vergleich der Ergebnisse mit EXAFS-Messungen	96
Zusammenfassung und Ausblick	123
Anhang	126
A Symmetrietransformation der Kopplungstensoren	127
B Reduktionsdaten der Diamant- und Zinkblendestruktur	129
Literaturverzeichnis	133
Dank	139