

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	3
I Theorie	9
1 Berechnung der Grundzustandsenergie	11
1.1 Oberflächenstrukturen in der Geometrie periodisch wiederholter Kristallfilme	11
1.2 Vielteilchensysteme und adiabatische Näherung	12
1.3 Grundlagen der Dichtefunktionaltheorie	13
1.4 Impulsraumdarstellung und Pseudopotentiale	16
2 Ionische Kräfte und Molekulardynamik	19
2.1 Hellmann-Feynman-Kräfte	19
2.2 Integration der atomaren Bewegungsgleichungen	20
2.3 Mikrokanonisches und kanonisches Ensemble	20
3 Berechnung vibronischer Eigenschaften	22
3.1 Symmetriebeziehungen der dynamischen Größen	22
3.2 Berechnung dynamischer Matrizen mit der Dichtefunktional-Störungstheorie	24
3.3 Polare Halbleiter	27
II Entwicklung von Modellbeschreibungen	31
4 Lokaler Kopplungstransfer als Ergänzung zu Ab-initio-Methoden zur Berechnung vibronischer Eigenschaften großer Oberflächenrekonstruktionen	33
4.1 Einführung	33
4.2 Theoretische Grundlagen zu den Ab-initio-Rechnungen	36
4.3 Oberflächenrekonstruktionen von Ge(001), Si(001) und C(001)	37
4.4 Phononendispersionsrelationen der $p(2\times 1)$ -Phasen von Ge(001) und Si(001) .	39

4.5	Einfluß der Streck- und transversalen Kraftkonstanten in Ge(001) und Si(001) auf die Phononendispersionskurven	44
4.6	Vergleich mit C(001)	46
4.7	Entwicklung des LCT-Verfahrens am Beispiel der höheren Rekonstruktionen von Ge(001)	48
4.8	Anwendung des LCT-Verfahrens auf Si(001)	54
4.9	Vergleich der Oberflächenphononen von Ge(001) und Si(001)	58
5	Erzeugung universeller Mehrteilchen-Wechselwirkungspotentiale	62
5.1	Parametrisierung der Potentiale	66
5.2	Konstruktion der Potentiale	76
5.3	Einfache Beispiele	79
5.4	Anpassung an Ab-initio-Daten	87
Zusammenfassung		95
Literaturverzeichnis		103
Dank		108