

## Kurzfassung

Grundlegende Eigenschaften der isomorphen Volumenkristalle Lithiumniobat ( $\text{LiNbO}_3$ , LN) und Lithiumtantalat ( $\text{LiTaO}_3$ , LT) werden mittels *ab initio*-Methoden untersucht. Im ersten Teil dieser Dissertation werden die Vibrationseigenschaften von stöchiometrischem  $\text{LiNbO}_3$  und  $\text{LiTaO}_3$  im Rahmen der Dichtefunktionalstörungstheorie analysiert, um die vollständige Phononendispersion der beiden Materialien zu generieren. Das Auftreten imaginärer Frequenzen in der paraelektrischen Phase zeigt, dass diese nicht aus einer energetischen Minimumstruktur herrühren und befindet sich im Einklang mit einem Ordnungs-Unordnungs-Phasenübergang. Die berechnete Nullpunktsrenormierung der elektronischen Kohn-Sham-Eigenwerte offenbart eine Vibrationskorrektur der elektronischen Bandlücke von 0.41 eV bei 0 K, die sich in exzellenter Übereinstimmung mit extrapolierten temperaturabhängigen Messungen befindet. Außerdem beläuft sich die zusätzliche temperaturabhängige Rotverschiebung der Bandlücke auf 0.1 eV bei Raumtemperatur.

Der zweite Teil der Arbeit ist auf die optischen Eigenschaften von LN ausgerichtet. Die dielektrische Funktion von defektfreiem, kongruentem und Titan-dotiertem Lithiumniobat wird mithilfe der zeitabhängigen Dichtefunktionaltheorie berechnet, wobei ein modellhafter langreichweiterer Beitrag für das Austauschkorrelationsfunktional verwendet wird, um die Elektron-Loch-Bindung zu berücksichtigen. Die Auswirkungen von Polaronen, die an isolierten Niobdefekten angesiedelt sind, und Bipolaronen, welche sich bis zum benachbarten Niobatom ausdehnen, werden im Detail untersucht. Dabei werden vier verschiedene Niobpunktdefekte und -defektcluster modelliert und analysiert. Die experimentell beobachteten Absorptionsmerkmale der Polaronen können am besten mit dem Zwischengitter-Vakanz-Paar  $\text{Nb}_V - \text{V}_{\text{Li}}$  erklärt werden. Weiterhin liegt der Fokus auf dem Einfluss von Titansubstitutionsatomen, überwiegend simuliert auf Lithiumgitterplätzen. Es wird gezeigt, dass eine steigende Titankonzentration den Brechungsindex und die Reflektivität erhöht.