

Kurzbeschreibung

In der vorliegenden Arbeit wurde das variationelle EXX-Verfahren (varEXX) [78, 79, 80] in einen Pseudopotential-Ebene-Wellen-Code (S/PHI/nX [81, 82]) implementiert, und die Methode — zuvor nur an lokalisierten Systemen getestet — so erstmals auch für periodische Strukturen verfügbar gemacht. Anschließend durchgeführte Tests an verschiedenen Halbleitermaterialien zeigten, dass varEXX die benötigte Rechenzeit im Vergleich zur herkömmlichen, numerisch äußerst aufwändigen Formulierung des EXX-Verfahrens drastisch reduziert, dabei jedoch nur einen Bruchteil des Speicherplatzes benötigt. Als Beispiel für die auf diese Weise deutlich erweiterten Anwendungsmöglichkeiten des EXX-Formalismus wurde untersucht, ob sich exakte Austauschpotentiale annähernd linear in Abhängigkeit von der Ladungsdichte verhalten, was von großer Bedeutung für die Verwendung von EXX-Pseudopotentialen ist. Es konnten erstmals DFT-Berechnungen mit exaktem Austauschpotential für GaN und InN durchgeführt werden, bei denen die komplette semi-core-Schale der Kationen (3. Schale bei Ga, 4. Schale bei In) explizit in der Valenz berücksichtigt wird. Diese wurden anschließend mit Rechnungen, die nur die 3d- bzw. 4d-Elektronen als Valenzelektronen behandeln, verglichen. Ein weiterer Fokus der Arbeit lag auf der Entwicklung eines Konstruktionsschemas für ab-initio-Parameter im Modell starker Bindung (Tight-Binding-Modell) [122]. Die Methode basiert auf dem Konzept der Verallgemeinerten Wannier-Funktionen von Marzari und Vanderbilt [116], und erlaubt es, die elektronische Struktur (Eigenenergien und Eigenzustände) sehr großer Systeme mit mehreren Tausend Atomen in der Genauigkeit atomistischer Berechnungen auszuwerten. Dies kann etwa zur Berechnung der optischen Eigenschaften von Quantenpunkten eingesetzt werden, wobei dann auf DFT-EXXBerechnungen zurückgegriffen werden kann, um eine korrekte Beschreibung der Bandlücke zu gewährleisten. Im Rahmen dieser Arbeit wurden effektive ab-initio-Parametersätze für das GaN- und InN-Volumensystem entwickelt und hinsichtlich ihrer Eignung zur Beschreibung der Bandstruktur sorgfältig getestet.