



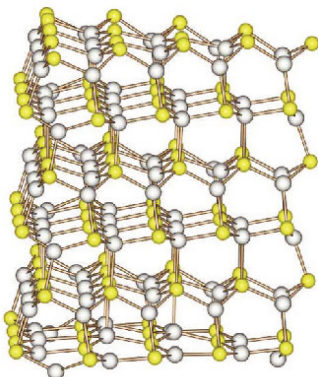
Peter Deglmann (Autor)  
**Zweite analytische Ableitungen in der  
Dichtefunktionaltheorie und  
Dichtefunktionaluntersuchungen von  
Halbleiterclustern**

Peter Deglmann

---

Zweite analytische Ableitungen  
in der Dichtefunktionaltheorie  
und  
Dichtefunktionaluntersuchungen  
von Halbleiterclustern

---



**Cuvillier Verlag Göttingen**

<https://cuvillier.de/de/shop/publications/3630>

Copyright:

Cuvillier Verlag, Inhaberin Annette Jentsch-Cuvillier, Nonnenstieg 8, 37075 Göttingen,  
Germany

Telefon: +49 (0)551 54724-0, E-Mail: [info@cuvillier.de](mailto:info@cuvillier.de), Website: <https://cuvillier.de>

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>7</b>
1.1	Zweite analytische Ableitungen in der Dichtefunktionaltheorie	7
1.2	Theoretische Behandlung von II-VI Halbleiterclustern . . . . .	9
<b>2</b>	<b>Theoretische Grundlagen</b>	<b>11</b>
2.1	Die Hartree-Fock-Methode . . . . .	11
2.2	Dichtefunktionaltheorie . . . . .	14
2.3	Bemerkungen zur Nomenklatur . . . . .	18
2.4	Zweite analytische Ableitungen des Hartree-Fock-Energiefunktionals . . . . .	19
2.5	Zweite analytische Ableitungen des DFT-Energiefunktionals .	22
2.6	Numerische Integration und Ableitungen der Quadraturgewichte . . . . .	26
<b>3</b>	<b>Implementierung und Testrechnungen</b>	<b>33</b>
3.1	Genauigkeit zweiter Ableitungen der DFT-Potenzialhyperfläche	34
3.2	Symmetrienausnutzung . . . . .	36
3.2.1	Symmetrienausnutzung in der Integralberechnung . . . .	37
3.2.2	Symmetrienausnutzung in dreifach indizierten Größen in der Basis symmetrieadaptierter atomarer Auslenkungen . . . . .	38
3.2.3	Ausschließliche Berechnung von Kraftkonstanten für relevante irreduzible Darstellungen . . . . .	40
3.3	Berechnung der DFT-Beiträge zur Hessematrix . . . . .	42
3.3.1	Zweite Ableitungen der Austauschkorrelationsenergie bei konstanter Elektronendichte . . . . .	42
3.3.2	DFT-Beiträge zur ersten Ableitung der Fockmatrix bei konstanter Elektronendichte . . . . .	44
3.3.3	Beiträge des Austauschkorrelationskerns . . . . .	46
3.3.4	Effiziente Berechnung von Ableitungen der Quadraturgewichte . . . . .	48

3.3.5	Genauigkeit der numerischen Integration . . . . .	50
3.4	Lösung der CPHF/CPKS-Gleichungen . . . . .	53
3.5	Die Suche niedrigster Eigenwerte der Hesse-Matrix . . . . .	54
3.5.1	Produkte der Hessematrix mit Suchvektoren . . . . .	55
3.5.2	Wahl der Suchvektoren . . . . .	57
3.5.3	Iterative Bestimmung der niedrigsten Eigenwerte . . . . .	58
3.6	Skalierungsverhalten der Programmteile . . . . .	60
3.6.1	Normale Kraftkonstantenrechnungen . . . . .	60
3.6.2	Berechnung niedrigster Eigenwerte . . . . .	63
3.7	Anwendungsbeispiele . . . . .	65
3.7.1	Schwingungsspektren von Carbonylverbindungen . . . . .	65
3.7.2	Übergangszustände bei der Racemisierung von Helizinen . . . . .	66
3.8	Zusammenfassung . . . . .	68
<b>4</b>	<b>DFT-Untersuchungen von Halbleiterclustern</b>	<b>71</b>
4.1	Genauigkeit der Methode . . . . .	71
4.1.1	Vergleich mit CCSD(T) . . . . .	71
4.1.2	Vergleich mit anderen Funktionalen und MP2 . . . . .	73
4.2	Eigenschaften kleiner Cluster der Formel $Zn_nS_n$ , $Zn_nSe_n$ , $Cd_nS_n$ und $Cd_nSe_n$ . . . . .	75
4.2.1	Monomere $MX$ . . . . .	76
4.2.2	Dimere $M_2X_2$ . . . . .	77
4.2.3	Trimere $M_3X_3$ . . . . .	79
4.2.4	Tetramere $M_4X_4$ . . . . .	80
4.2.5	Pentamere $M_5X_5$ . . . . .	82
4.2.6	Hexamere $M_6X_6$ . . . . .	85
4.2.7	Heptamere $M_7X_7$ . . . . .	87
4.2.8	Struktur und Energetik der kleinen Cluster . . . . .	88
4.2.9	Thermodynamische Betrachtungen . . . . .	90
4.3	Eigenschaften größerer Cluster der Formel $Zn_nS_n$ und $Cd_nSe_n$ . . . . .	92
4.3.1	“Baupläne” der Wurtzitcluster . . . . .	93
4.3.2	Struktur und Energetik der Wurtzitcluster . . . . .	97
4.3.3	Elektronische Eigenschaften der Wurtzitcluster . . . . .	103
4.4	Zusammenfassung . . . . .	111
	<b>Abkürzungen</b>	<b>113</b>
	<b>Verwendete Programme</b>	<b>114</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>115</b>