

Zusammenfassung

Aufgrund seiner hervorragenden elektrischen und optischen Eigenschaften hat sich GaAs mittlerweile als Ausgangsmaterial für Hochgeschwindigkeits- und optische Bauelemente durchgesetzt. Daher besteht ein stetig wachsender Bedarf an hochwertigen GaAs Substraten und an einer verbesserten Herstellung von elektrisch und optisch aktiven Strukturen in GaAs. Insbesondere sucht man nach effizienteren Dotiermaterialien und möchte die Eigenschaften von ausgedehnten Defekten, Ober- und Grenzflächen umfassend aufklären. In der vorliegenden Arbeit werden daher Geometrie, Stabilität und Eigenschaften von komplexen Strukturen in GaAs theoretisch untersucht, wie sie während des Wachstums, bei der Nachbehandlung und bei der Dotierung auftreten. Dazu wird eine Methode verwendet, die auf der Dichtefunktionaltheorie basiert und damit eine bestmögliche Genauigkeit liefert. Diese Methode wurde außerdem auf Parallelrechnern implementiert, um die Untersuchung von ausgedehnten Strukturen zu ermöglichen.