

Bibliographische Beschreibung und Inhaltsangabe

SIECK, ALEXANDER

Structure and physical properties of silicon clusters and of vacancy clusters in bulk silicon

Universität Paderborn, Fachbereich für Physik

Dissertation, 2000 (in englischer Sprache)

143 Seiten, 49 Abbildungen, 19 Tabellen, 138 Literaturzitate

In dieser Arbeit wird der Wachstumsprozess von freien Silizium Clustern und von Leerstellen-Clustern in kristallinem Silizium untersucht. Das Ziel ist u.a. den Übergang vom Cluster über Nanostrukturen bis zum Festkörper zu beschreiben und zu verstehen. Im Bereich zwischen Clustern und Festkörpern treten Silizium Strukturen mit neuen interessanten physikalischen Eigenschaften auf. Die Identifikation der Struktur und Funktion von Silizium Clustern ist nur durch eine Kombination von Theorie und Experiment möglich. Mittels verschiedener Optimierungsstrategien und einer auf Dichtefunktional-Theorie basierten "Tight-Binding" Methode werden Cluster-Strukturen mit besonders niedriger Bindungsenergie bestimmt. Für die stabilsten kleineren Cluster werden die Infrarot- und Raman-Spektren, sowie deren Polarisierbarkeiten im Rahmen selbst-konsistenter Dichtefunktional-Theorie berechnet. Für Cluster mit 25 bis 35 Atomen wird die Form der Cluster und deren Beweglichkeit in He-Gas analysiert. Die bei niedrigen Temperaturen im Experiment beobachteten Cluster werden anschließend anhand der Übereinstimmung von berechneten Eigenschaften mit den experimentellen Daten identifiziert. Silizium Cluster mit 10 bis 15 Atomen haben ein dreifach-gekapptes trigonales Prisma als gemeinsame Untereinheit. Bis zu Clustern mit etwa 25 Atomen geht der Wachstumsprozeß über prolate Strukturen. Im Bereich von 24- bis 30-atomigen Clustern verändert sich die Geometrie hin zu kompakten sphärischen Strukturen. Niedrig-energetische Cluster bestehend aus bis zu 240 Atomen weisen ein Bindungsmuster auf, das sehr stark von dem des Festkörpers abweicht. Dadurch weichen auch die elektrischen und optischen Eigenschaften der Strukturen mit Abmessungen im Ångström Bereich von denen im Festkörper ab. Die Berechnung der Stabilität verschiedener Leerstellen-Cluster in kristallinem Silizium und der zugehörigen Positronen-Lebensdauern weisen darauf hin, daß die in bestrahltem Silizium gemessenen Positronen-Lebensdauern von ca. 435 ps zu Clustern bestehend aus 9 oder 10 Leerstellen gehören. Die Leerstellen in diesen Clustern bilden benachbarte Sechser-Ringe und weisen somit eine minimale Anzahl hängender Bindungen auf.

Schlagwörter

Silizium Cluster, Leerstellen-Cluster, Dichtefunktional-Theorie, Tight-Binding, Infrarot-Spektrum, Raman-Spektrum, Beweglichkeiten, Positronen-Lebensdauern