

Michael Sternberg, *Die Atomare Struktur von Diamantoberflächen und Grenzflächen*.  
Dissertation (in englischer Sprache), Fachbereich Physik, Universität Paderborn (2001).  
137 Seiten, 41 Abbildungen, 24 Tabellen.

## Kurzfassung

Diese Dissertation untersucht verschiedene theoretische Fragen zu Wachstum und Struktur von Diamantschichten, welche mittels chemischer Dampfphasenabscheidung hergestellt werden. Die Arbeit ist in zwei Hauptteile gegliedert, von denen der erste methodischen Charakter hat und der zweite Anwendungen gewidmet ist.

Nach einem Überblick zur Theorie der Elektronenstruktur werden einige Aspekte der Dichtefunktional-basierten Tight-Binding Methode (DFTB) beleuchtet, insbesondere deren Beziehung zu den zugrundeliegenden Dichtefunktionalen. Ferner wird ein Rückblick zu den angewandten Näherungen in den verschiedenen Implementierungen des Verfahrens im Verlauf der letzten Jahre gegeben. In der vorliegenden Arbeit wird die Methode um eine linear skalierende ( $\mathcal{O}(N)$ ) Formulierung erweitert. Der Teil schließt mit Testergebnissen und einer allgemeinen Einschätzung ab.

Im zweiten Teil wird die Standard-DFTB-Variante auf verschiedene Probleme im Umfeld von Diamantmaterialien angewandt. Zunächst wird ein Überblick zu Eigenschaften des Diamantfestkörpers und seinen Oberflächen gegeben. Daten zu Energie und Geometrie ebnen den Weg zu den anschließenden Rechnungen und dienen zur Abschätzung ihrer Zuverlässigkeit. Die verbleibenden Kapitel behandeln Fragen zur relativ neuen Klasse von ultrananokristallinen Diamantschichten (UNCD), welche hauptsächlich mittels  $C_2$ -Spezies gewachsen werden. Anhand von Berechnungen zu Gesamtenergien und Barrieren an einer ursprünglich reinen Oberfläche, gefolgt von Kettenwachstum und -verschmelzung sowie abgeschlossen durch die Auffüllung von Oberflächenleerstellen wird ein vollständiger Mechanismus zum Wachstum einer (110) Monolage aufgestellt. Der Mechanismus unterscheidet sich qualitativ von konventionellem, methylbasiertem Wachstum. Eine Stabilisierung der Diamantphase gegenüber Graphit unter Einfluß von  $C_2$  und ohne Wasserstoff wurde beobachtet.

Schließlich wird die innere Struktur der UNCD-Schichten anhand von vergleichsweise hochenergetischen (100) Großwinkeldrehkorngrenzen untersucht. Die Korngrenzen unterscheiden sich von jenen in mikrokristallinem Diamant, wo Kleinwinkelkorngrenzen, Kippkorngrenzen sowie Zwillingsbildung vorherrschen. Zunächst wird die Struktur von reinen Korngrenzen aufgestellt, gefolgt von Betrachtungen zum Einfluß von Defekten. Die Korngrenzen werden als extrem dünn bestätigt, da sie lediglich zwei atomare Monolagen umfassen. Die atomare Struktur ist gekennzeichnet durch dreifach koordinierte Atome, welche etwa 50% aller Grenzflächenatome ausmachen und elektronische Zustände in der Bandlücke hervorrufen. Die an den Schichten beobachtete elektrische Leitfähigkeit wird Kohlenstoff- $\pi$ -Zuständen innerhalb der Korngrenzen zugeschrieben. Es wird festgestellt, daß Stickstoffverunreinigungen in die Korngrenzen energetisch günstiger als in das Innere der Kristalle einzufügen sind sowie außerdem die Dreifachkoordinierung von Kohlenstoffatomen fördern. Eine Verschiebung des Fermi niveaus zum Leitungsband hin wurde bei höheren Stickstoffkonzentrationen konstatiert. Diese Mechanismen stützen experimentelle Befunde einer erhöhten elektrischen Leitfähigkeit infolge von Stickstoff. Im Gegensatz dazu sättigt Wasserstoff freie Bindungen ab und senkt daher die Leitfähigkeit.

## Schlagwörter

Diamant, Oberflächen, Korngrenzen, Wachstum, Leitfähigkeit, Dichtefunktional-Theorie, Tight-Binding, Lineare Skalierung,  $\mathcal{O}(N)$