

Uwe Gerstmann, *Einfluß von Gitterverzerrungen auf Anregungsenergien und Hyperfeinparameter paramagnetischer Defekte*.

Dissertation (in deutscher Sprache), Fachbereich Physik, Universität Paderborn (2002).

131 Seiten, 38 Abbildungen, 12 Tabellen.

Kurzfassung

In dieser Dissertation wurde das LMTO-ASA-Greenfunktionen-Verfahren zur *ab initio*-Berechnung von tiefen Defekten in Halbleitern verwendet. Es wurde dabei so erweitert, daß nun auch eine Vorhersage von defektinduzierten Gitterrelaxationen möglich ist. Dies gelang unter Beibehaltung der sog. *Atomic Spheres Approximation* (ASA), was bislang in der Literatur als unmöglich angesehen wurde. Ein großer Teil dieser Arbeit besteht daher zunächst aus Referenzrechnungen, insbesondere an isolierten Vakanzen in SiC sowie Diamant. Darin erweist sich das erweiterte LMTO-ASA-Verfahren als in der Lage, durch Minimierung der Gesamtenergie symmetrierniedrigende Jahn-Teller-Verzerrungen korrekt vorherzusagen. Es zeigen sich auch Erfolge bei der Berechnung der Hyperfeinwechselwirkung paramagnetischer Defekte: Sind zuvor für unrelaxierte Strukturen an den Liganden noch deutliche Diskrepanzen zwischen Theorie und Experiment beobachtbar, so verschwinden diese für die ermittelten Gleichgewichtsgeometrien nahezu vollständig. Die Abhängigkeit der numerisch ermittelten Hyperfeinparameter von der Ligandenrelaxation kann dabei mit einem erweiterten Hybridisierungsmodell qualitativ erklärt und verstanden werden.

So kann in Diamant eine bisher in der Literatur übliche Zuordnung von Hyperfeinparametern substitutioneller Defekte zur übernächsten Nachbarschale eindeutig als falsch nachgewiesen werden: Die im Experiment beobachtbaren Hyperfeinaufspaltungen sind vielmehr den fünftnächsten Nachbarn zuzuordnen.

Im zweiten Teil dieser Arbeit wird das erweiterte LMTO-ASA-Verfahren dazu verwendet, Anregungsenergien und Hyperfeinparameter auch angeregter Zustände von Farbzentren in Diamant (diverse Stickstoff-Vakanz-Komplexe) im Rahmen der lokalen Spindichte-Näherung (LSDA) der Dichtefunktionaltheorie (DFT) zu berechnen. Die Hyperfeinparameter werden dabei unter Berücksichtigung der Gleichgewichtsgeometrien in einer Genauigkeit berechnet, die der für Grundzustände in nichts nachsteht. Zudem kann der Anregungsmechanismus der neutralen Vakanz in Diamant quantitativ erklärt werden.

Einige Zustände sind nicht mit nur einer LSDA-Konfiguration beschreibbar. Dabei auftretende Konfigurationswechselwirkungen (CI) gehen allerdings über den Rahmen der LSDA hinaus. Eine korrekte Berechnung der Gesamtenergie (und damit von Anregungsenergien) in LSDA ist in diesen Fällen im allgemeinen nicht mehr möglich. Allerdings werden Hyperfeinwerte auch schon dann mit *einer* Konfiguration in LSDA in erstaunlich guter Übereinstimmung mit dem Experiment beschrieben, wenn diese Konfiguration die richtige Vielteilchensymmetrie aufweist.

Dies bestätigt sich am klassischen Beispiel der negativen Vakanz in Silizium, bei der allerdings eine über die nächsten Nachbarn hinausgehende Gitterverzerrung zu berücksichtigen ist. Dazu benutzen wir ein kombiniertes Verfahren: Die Gleichgewichtsgeometrie wird mit Hilfe einer etablierten Superzellenmethode bestimmt. Danach wird das erweiterte LMTO-ASA-Verfahren dazu benutzt, die Hyperfeinparameter zu dieser gegebenen Geometrie zu berechnen. Insgesamt stehen somit effiziente Methoden zur Verfügung, den *Einfluß von Gitterverzerrungen auf Anregungsenergien und Hyperfeinparameter paramagnetischer Defekte* zu untersuchen.

Schlagwörter

Dichtefunktionaltheorie, angeregte Zustände, LMTO-ASA-Verfahren, Greensche Funktionen, Defekte, Gitterrelaxation, Hyperfeinwechselwirkung, Diamant, SiC, Silizium