

Alexander Thorsten Blumenau, *Modellierung von Versetzungen in Halbleiterkristallen*.  
Dissertation (in englischer Sprache), Department Physik, Fakultät für Naturwissenschaften,  
Universität Paderborn (2002).  
140 Seiten, 70 Abbildungen, 14 Tabellen.

## Kurzfassung

Diese Dissertation befaßt sich mit der theoretischen Modellierung von Versetzungen in Halbleiterkristallen. Ein besonderes Augenmerk gilt dabei den technologierelevanten Auswirkungen von Versetzungen in Diamant und Siliziumkarbid.

Eine umfassende Beschreibung der durch Versetzungen hervorgerufenen Effekte erstreckt sich über mehrere Größenordnungen auf der Längenskala — angefangen von der elektronischen Struktur einer kleinen Core-Region, bis hin zu langreichweitigen elastischen Effekten. Da dies alles mit einer einzigen Methode nicht in jeweils ausreichender Genauigkeit erreicht werden kann, ist es ein Ziel dieser Arbeit, *durch die Kombination unterschiedlicher theoretischer Methoden eine umfassendere Beschreibung von Versetzungen in Halbleiterkristallen zu erreichen*: Die Dichtefunktionaltheorie (DFT) bildet die Grundlage für atomistische quantenmechanische Rechnungen, in denen elektronische Strukturen in einem DFT-Pseudopotentialansatz bestimmt werden. Im Gegensatz dazu erfolgt die Vorhersage von atomaren Strukturen und deren Energien unter Verwendung einer DFT-basierten Tight-Binding Methode. Diese ist zwar approximativer, aber deshalb auch rechentechnisch wesentlich effizienter und erlaubt somit die Einbettung von Versetzungen in Modelle mit einer größeren Anzahl von Atomen. Die Beschreibung der langreichweitigen elastischen Effekte ist schließlich mit Hilfe linearer Elastizitätstheorie unter minimalem Rechenaufwand möglich.

Nach einer Einführung in die verwendeten Methoden und die Grundlagen der Versetzungslehre wird anhand des  $\{111\}$   $\langle 110 \rangle$ -Versetzungssystem in Diamant die Kombination der verschiedenen Methoden demonstriert. Dabei werden sowohl geradlinige perfekte als auch dissoziierte Versetzungen betrachtet. In beiden Fällen erfolgt ein direkter Vergleich mit experimentellen Daten: Die resultierenden Core-Geometrien können zur Simulation von transmissions-elektronenmikroskopischen Bildern verwendet werden und die Berechnung der elektronischen Struktur ermöglicht die Modellierung von Elektronen-Energieverlust-Spektren.

Desweiteren wird das thermisch aktivierte Gleiten von Shockley-Partialversetzungen in Diamant durch einen Prozeß modelliert, dessen wesentliche Schritte durch die Bildung von Knicken ("kinks") in der Versetzungslinie und deren Migration gegeben sind.

Insgesamt unterstützen die erhaltenen Ergebnisse schließlich ein Ausheil-Szenario für braunen Naturdiamant, in dem Versetzungen mit "Shuffle"-Charakter in solche mit "Glide"-Charakter überführt werden. Ein solcher Mechanismus könnte die beobachtete Entfärbung brauner Diamanten unter extrem hohem Druck und hoher Temperatur erklären. Dieser bisher unverstandene Prozeß ist von größtem Interesse im internationalen Diamant-handel.

Ein aktuelles Problem der modernen Siliziumkarbid-Technologie stellt die beobachtbare katastrophale Degradation von unter Vorwärtsspannung betriebenen bipolaren Bauelementen dar. Diese ist vermutlich auf ein sogenanntes rekombinationsverstärktes Versetzungsgleiten zurückzuführen. Um diesen Mechanismus besser zu verstehen, werden in dieser Arbeit die verschiedenen beteiligten Partialversetzungen und ihre Gleitbewegung modelliert. Die resultierenden elektronischen Strukturen und Gleitaktivierungsenergien werden im Anschluß direkt mit aktuellen experimentellen Beobachtungen in Verbindung gebracht.

## Schlagwörter

Versetzungen, Diamant, Siliziumkarbid, SiC, Dichtefunktionaltheorie, Elastizitätstheorie