

Eva Rauls, *Annealing Mechanisms of Point Defects in SiC – A Theoretical Investigation*  
(*Ausheilmechanismen von Punktdefekten in SiC – eine theoretische Untersuchung*)  
Dissertation (in englischer Sprache), Theoretische Physik, Department Physik, Fakultät für Naturwissenschaften, Universität Paderborn (2003).  
119 Seiten, 69 Abbildungen, 18 Tabellen.

## Kurzzusammenfassung

Aufgrund hoher Anforderungen an die Rechenkapazität in ab initio Methoden und der geringeren Genauigkeit (semi-)empirischer Methoden ist bis heute wenig über die Dynamik von Defekten in Halbleitern bekannt. Dies ist jedoch wesentlich für technologischen Fortschritt beispielsweise bei der Herstellung von Bauelementen. Um Migrationsmechanismen elementarer Punktdefekte wie Vakanzen und Antisites sowie n-Typ Dotieratomen in Siliziumkarbid (SiC) zu untersuchen, wurde in dieser Arbeit eine approximative Methode verwendet, deren Genauigkeit vergleichbar mit der von ab initio Methoden ist. Die Verwendung dieser ladungsselbstkonsistenten Dichtefunktional-basierten Tight-Binding Methode (SCC-DFTB) erlaubt eine systematische Untersuchung der Defekt-Dynamik, die in diesem Rahmen mit einer ab initio Methode nicht praktikabel ist.

Ausgehend von einer Diskussion verschiedener Mechanismen zur Bildung eines Antisite-Paares  $C_{Si} Si_C$ , welches als Kandidat für die  $D_1$ -Photolumineszenz im Gespräch ist, wurde die Bildung von Antisite-Aggregaten untersucht. Die berechneten Aktivierungsenergien zeigen, daß dabei der Vakanzen-Migration eine Schlüsselrolle in der Mobilität einzelner Antisites und damit bei der Bildung von Antisite-Aggregaten zukommt. Obwohl größere Antisite-Aggregate außerordentlich stabil sind, scheint ihre Bildung nur durch eine spezielle epitaktische Methode während des Wachstums möglich zu sein. Da die Energiebarrieren für die Rekombination mit der "erzeugenden" Vakanzen niedriger sind als für die Erzeugung weiterer Antisites, endet die zwei-dimensionale Aggregation nach der Bildung eines Antisite-Paares. Für "zwiebelartig" aufgebaute Strukturen wie  $Si_C (C_{Si})_4$  konnte ein Bildungs-Mechanismus basierend auf der Beweglichkeit von  $C_{Si}$  gefunden werden. Die Berücksichtigung der üblicherweise vernachlässigten Entropie-Beiträge zur Energie führte zu keiner qualitativen Veränderung der Ergebnisse, obwohl gezeigt werden konnte, daß diese Beiträge bei den zur Aktivierung der Prozesse erforderlichen hohen Temperaturen nicht vernachlässigbar sind.

Die Untersuchungen dieser Arbeit beschränkten sich jedoch nicht auf intrinsische Defekte. Um das bekannte Problem der Sättigung der freien Ladungsträgerkonzentration bei hohen Stickstoff Dotier-Konzentrationen in SiC zu verstehen, wurde das Ausheilverhalten der implantierten Stickstoff-Ionen untersucht. Kohlenstoff Split-Interstitials  $(CC)_C$  können Stickstoff in Form von Split-Interstitials  $(NC)_C$  mobilisieren. Berechnungen basierend auf der Migration dieser Split-Interstitials konnten bestätigen, daß Stickstoff bevorzugt auf dem C-Platz eingebaut wird. Silizium Leerstellen werden nicht einfach aufgefüllt, sondern ein "Kick-out" Mechanismus führt zu  $V_{Si} N_C$  oder  $C_{Si} N_C$  Paaren. Das  $V_{Si} N_C$  Paar ist dabei ein erster Schritt zur Bildung von  $V_{Si} (N_C)_4$  Komplexen, welche sich als sehr stabil gegen Dissoziation und als elektrisch inaktiv erweisen und daher die beobachtete effiziente Passivierung der Dotieratome erklären können.

Auch für Phosphor als alternatives n-Typ Dotieratom wurde ein Split-Interstitial basierter Migrations-Mechanismus gefunden. Die Untersuchung von Rekombinations-Prozessen von Phosphor Split-Interstitials  $(PC)_C$  und  $(PSi)_{Si}$  mit Vakanzen hat ergeben, daß Phosphor im Gegensatz zu Stickstoff sowohl auf Si- als auch auf C-Plätzen eingebaut werden kann. Dadurch wird die Bildung inaktiver Komplexe wie für Stickstoff beschrieben verhindert, was P gegenüber N zur n-Typ Dotierung auszeichnet.

## Schlagwörter

Siliziumkarbid (SiC), Dichtefunktionaltheorie, Tight-Binding, Punktdefekte, Aggregation, Diffusion, Annealing, Ionen Implantation