Simone Sanna, *Seltene Erde Punktdefekte in GaN.*
Dissertation (in englischer Sprache), Department Physik, Fakultät für Naturwissenschaften, Universität Paderborn (2007). 157 Seiten, 64 Abbildungen, 30 Tabellen.

Kurzfassung

In dieser Arbeit wird seltene Erde dotiertes GaN mit Hilfe von Computersimulationen untersucht. Die Emissionsspektren der seltenen Erde Ionen (SE) sind von scharfen Linien gekennzeichnet, die dem zugehörigen Übergang in der f-Schale entsprechen. SE-dotiertes GaN wurde erfolgreich für die Herstellung von flachen Displays benutzt, auch wenn die SE-Lumineszenz bis zum heutigen Tag keinem bestimmten Defektzustand zugeordnet werden konnte.
Die sehr großen Einheitszellen, die erforderlich sind, um die experimentellen Konzentrationen zu reproduzieren, werden mit dem Ladung-selbstkonsistenten dichtefunktionalbasierten Tight-Binding Verfahren (SCC-DFTB) untersucht. Die Methode wurde auf orbitalabhängigen Potentiale erweitert, die für die Simulation von Systemen mit stark korrelierten Elektronen notwendig sind, nämlich LDA+U und Self-Interaction Correction (pSIC) Methode. Das Verfahren kombiniert die Effizienz der Tight-Binding Methode mit der Genauigkeit von anspruchsvolleren *ab initio* Verfahren und ermöglicht so die Untersuchung von stark lokalisierten Elektronen auch in größeren Systemen.
Ein Satz von Tight-Binding Parameter wurde erzeugt, um die Wechselwirkung von GaN mit einer Auswahl von SE-Dotiersubstanzen zu modellieren, welche wegen ihrer optischen oder magnetischen Eigenschaften von Interesse sind (Pr, Eu, Gd, Er, Tm). Dabei wurden die f-Elektronen als Valenzelektronen behandelt. Die Tauglichkeit der Parameter wurde anhand von experimentell bekannten Testsystemen überprüft. Insbesondere, ErN in der Kochsalz Struktur ist ausführlich untersucht worden und ist in der DFTB-Darstellung ein Halbmetall in der ferromagnetischen Phase.
DFTB bietet die Möglichkeit eines der größten Probleme der dichtefunktionaltheoretischen Rechnungen (DFT) in der Lokaldichte-Näherung (LDA) zu umgehen, nämlich die Unterschätzung der elektronischen Bandlücke. Eine qualitativ korrekte Beschreibung der Bandlücke ist dabei eine Grundvoraussetzung für die Simulation von SE-dotierten Halbleitern, weil die Lumineszenzintensität der dotierten Probe von der Größe der Bandlücke abhängt und weil die Störatome Umladungniveaus in der Nähe der Leitungsbandkante einfügen. Diese Umladungen wurden in dieser Arbeit mit dem Slater-Janak (SJ) Modell berechnet, das eine annähernde Berechnung von elektronischen Umladungen durch die Analyse der Kohn-Sham DFT Eigenwerte ermöglicht.
Die Simulationen haben bestätigt, dass SE den Ga-Platz bevorzugen. Isolierte $\mathrm{SE_{Ga}}$ sind sehr stabile Defekte mit C_{3v} Symmetrie. $\mathrm{SE_{Ga}}$ verursachen eine relativ kleine Gitterverzerrung in GaN, ändern nur geringfügig die Ladungsverteilung der N-Liganden und werden daher leicht in dem GaN-Host aufgenommen. Seltene Erde in Zwischengitterstellen ($\mathrm{I_{SE}}$) sind nicht stabil und gehen in die energetisch günstigere $\mathrm{SE_{Ga}}$ $\mathrm{I_{Ga}}$ Konfiguration über.
Die von einem $\mathrm{SE_{Ga}}$ und einem N-Zwischengitteratom oder Antisite gebildeten Defektkomplexe ($\mathrm{I_N}$ und $\mathrm{Ga_N}$ oder $\mathrm{N_{Ga}}$) sind von großer Formationsenergie und niedriger Bindungsenergie gekennzeichnet, so dass sie mit großer Wahrscheinlichkeit bei Gleichgewichtbedingungen nicht vorkommen und, falls nach Implantation vorhanden, die Probenausheilung nicht überstehen würden. Unter den Defekten, die mit der Lumineszenz in Verbindung gebracht werden können, sind die von $\mathrm{SE_{Ga}}$ und benachbarten Leerstellen oder $\mathrm{O_N}$ Substitutionellen gebildeten Paare besonders wichtig. Diese Konfigurationen sind auch bei typischen Ausheilungtemperaturen stabil und induzieren zusätzliche lokalisierte Zustände in die Bandlücke. Anhand dieser Ergebnisse wird ein Modell für die Emissionsmechanismen vorgeschlagen, in dem die Energie der Ladungsträger über diese zusätzlich eingefügten Assistenz-Niveaus übermittelt wird.