



Doctoral Thesis

Towards a rational design of diamond crystals

Author(s):

Müller, Andreas Marcus

Publication Date:

1999

Permanent Link:

<https://doi.org/10.3929/ethz-a-003811754> →

Rights / License:

[In Copyright - Non-Commercial Use Permitted](#) →

This page was generated automatically upon download from the [ETH Zurich Research Collection](#). For more information please consult the [Terms of use](#).

Diss. ETH No 13063

Towards a Rational Design of Diamond Crystals

A dissertation
submitted to the

SWISS FEDERAL INSTITUTE OF TECHNOLOGY ZURICH

for the degree of

Doctor of Natural Sciences

presented by

Andreas Marcus Müller,
BS University of Illinois at Urbana-Champaign,
born Aug. 15, 1968,
citizen of Germany.

Accepted on the recommendation of
Prof. Peter Chen, examiner,
Prof. Renato Zenobi, co-examiner.

1999

1. Summary

Suggested mechanisms for diamond growth by chemical vapor deposition are verified using small model compounds. The model compounds are used to determine thermochemical information that is contrasted with semi-empirical and *ab-initio* calculations used previously in the evaluation of growth mechanisms.

Reagents are being synthesized and tested that allow key steps of diamond to grow under milder, controlled conditions.

Rate constants for key reactions as well as undesired reactions are measured in order to develop a computer-model of diamond growth steps using the newly synthesized reagents. The computer model is used to evaluate favorable reaction conditions.

In der Literatur vorgeschlagene Wachstumsmechanismen von Diamant bei der chemischen Dampfabcheidung werden mit Hilfe von Modellverbindungen überprüft. Die Modellverbindungen werden eingesetzt, um thermochemische Daten zu erhalten, welche dann mit semi-empirischen und *ab-initio* Rechnungen verglichen werden, die als Grundlage für die Beurteilung vorgeschlagener Mechanismen dienen.

Verbindungen werden synthetisiert und getestet, mit denen wichtige Schritte beim Diamantwachstum unter milderem, kontrollierten Bedingungen ablaufen können.

Geschwindigkeitskonstanten für diese Reaktionen, und auch für Nebenreaktionen, werden bestimmt, um ein Computermodell zu entwickeln für Reaktionen der neuen Verbindungen. Das Computermodell wird dann eingesetzt, um günstige Reaktionsbedingungen zu finden.