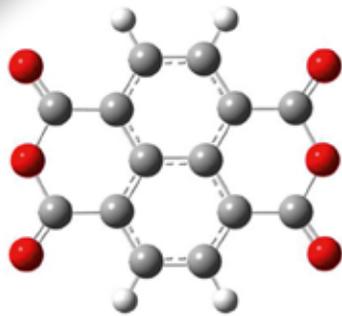


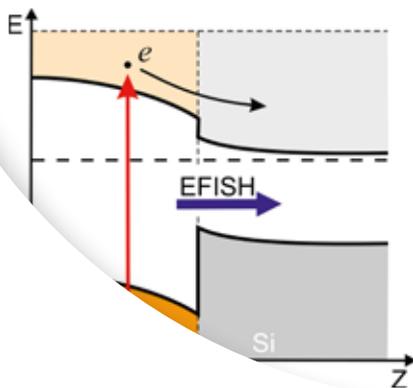
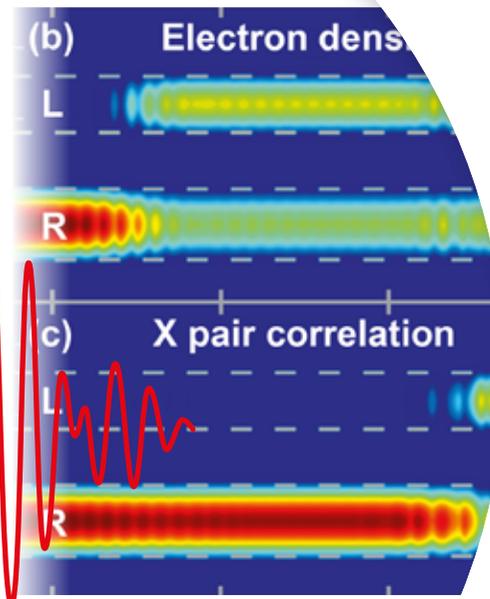


SFB 1083

Struktur und Dynamik
innerer Grenzflächen



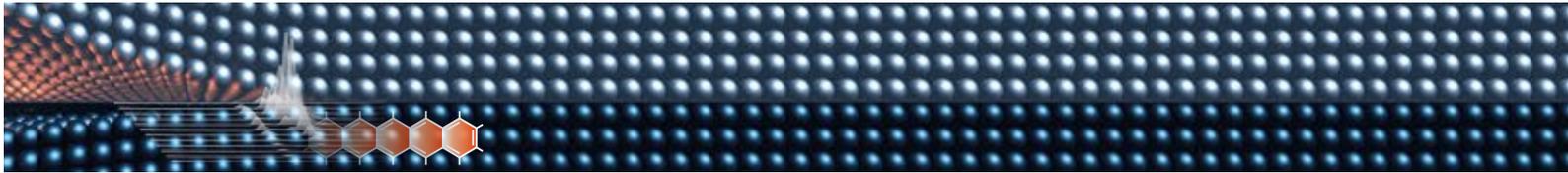
a_g Vibration



Faszination Grenzfläche

Struktur und Dynamik
innerer Grenzflächen

Inhalt



Faszination Grenzfläche	4
Wissenschaftliche Highlights	8
Projektbereich A	
Entwicklung und Charakterisierung von Modellsystemen	12
Projektbereich B	
Ladungstransfer und Optodynamik	34
Chemikum Marburg im SFB 1083 – Wir gehen an die Grenze	48
Internationale Partner	50
Infrastruktur – eine Übersicht	52
Projektübersicht	56
Zahlen & Fakten	60
Impressum	62

Faszination Grenzfläche

Elektronische Bauteile basieren darauf, dass an ihren inneren Grenzflächen – dort, wo zwei unterschiedliche Materialien aufeinander stoßen – die Ladungsträger entweder getrennt oder aber darüber hinweg transportiert werden. Doch wie funktioniert das genau auf mikroskopischer Skala? Wie lassen sich die physikalischen und chemischen Prozesse gezielt steuern? In einem Sonderforschungsbereich wollen Physiker und Chemiker gemeinsam die „Struktur und Dynamik innerer Grenzflächen“ von Grund auf verstehen lernen. Ihre Erkenntnisse dienen langfristig dazu, die Leistungsfähigkeit der Bauteile zu verbessern und Materialien mit neuen opto-elektronischen Eigenschaften zu entwickeln.

Die Miniaturisierung nimmt immer weiter zu: Milliarden von Transistoren finden auf Fingernagel-Größe Platz. Die typischen Abmessungen von Transistorstrukturen liegen bei wenigen Nanometern (Millionstel Millimeter). Damit steigen auch die Anzahl und die Bedeutung innerer Grenzflächen. Denn ihre optischen und elektronischen Eigenschaften bestimmen ganz wesentlich die Funktions- und Leistungsfähigkeit des Bauteils. Den deutsch-amerikanischen Physiknobelpreisträger Herbert Kroemer veranlasste das zur prägnanten Feststellung: „Die Grenzfläche ist das Bauteil.“

Gleichzeitig tritt an Grenzflächen eine Vielzahl neuer Phänomene auf, die ein weites Feld für die rein erkenntnisorientierte Grundlagenforschung bieten. Es können sich neuartige elektronische Zustände ausbilden, die weder eine Entsprechung im Volumen der beiden Festkörper noch in den Atomen haben, aus denen sie aufgebaut sind. Viele elementare Anregungen wie Elektron-Lochpaare (Exzitonen) oder Gitterschwingungen (Phononen) haben an der zweidimensionalen Grenzfläche völlig andere Eigenschaften als im dreidimensionalen Volumen. Genauso spannend sind die Strukturfragen: Wann verläuft die Grenzfläche zwischen zwei hochgeordneten Materialien atomar abrupt, wann bildet sich eine Art Mischphase aus, und kann man das steuern?



Professor Ulrich Höfer, Sprecher SFB 1083

Der Forschungsbedarf ist daher groß. Denn nicht nur verlangt die fortschreitende Miniaturisierung herkömmlicher Bauelemente ein besseres Verständnis der Grenzflächenprozesse. Weitere Materialien kommen hinzu: Leuchtdioden, Displays und Solarzellen, die auf organischen Materialien basieren, oder eines Tages vielleicht sogar Logikbausteine, bei denen einzelne Moleküle an einer Grenzfläche die Schaltvorgänge steuern. Hier treffen denn auch mit der Physik und der Chemie zwei wissenschaftliche Disziplinen aufeinander.

„Nur gemeinsam können die Forscherinnen und Forscher beider Fachrichtungen die Grenzflächen vielfältiger Materialkombinationen – anorganisch/organisch, Metall/Polymer, oder innerhalb von Halbleiter-Heterostrukturen – herstellen, charakterisieren und untersuchen“, sagt Ulrich Höfer. Der Physiker ist der Sprecher des im Jahr 2013 eingerichteten Sonderforschungsbereichs (SFB 1083) „Struktur und Dynamik innerer Grenzflächen“, der die physikalischen und chemischen Prozesse in Grenzflächen aufdecken soll.

Offene Fragen – Langfristige Forschung

Die Untersuchung der Grenzflächen gilt als eine der drängendsten Fragestellungen der aktuellen Festkörperphysik. „Grenzflächen sind erstens komplex. Und zweitens sind viele leistungsfähige experimentelle Untersuchungsmethoden der Festkörperphysik und der Oberflächenphysik nicht auf innere Grenzflächen übertragbar. Es ist schwierig, die schwachen Signale der Grenzflächen in den Experimenten

gegenüber dem Volumensignal herauszufiltern. Daher muss diese Forschung langfristig angelegt werden, wenn sie nachhaltige Erfolge erzielen soll“, betont Experimentalphysiker Ulrich Höfer und gibt ein Beispiel: „In der Oberflächenphysik hat es mehr als 20 Jahre gedauert, bis eine der markantesten Strukturen, die sogenannte 7x7-Rekonstruktion von Silizium, schließlich durch die Entwicklung des Rastertunnelmikroskops aufgeklärt werden konnte.“

An dem auf zwölf Jahre von der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) angelegten SFB beteiligen sich insgesamt 18 Forschergruppen aus der Physik und Chemie. Ins Leben gerufen wurde der SFB zunächst als Zusammenschluss von Marburger Wissenschaftlern, die sich zum Ziel gesetzt haben, den kleineren Standort durch die Zusammenarbeit in einem speziellen Themengebiet im Vergleich zu größeren Städten zu stärken. In der zweiten Förderperiode haben sich nun weitere Gruppen aus Gießen, ein Zusammenschluss von Oberflächenphysikern im Forschungszentrum Jülich und eine Theoriegruppe aus Münster hinzugesellt. Rund 80 Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler steuern ihre Expertise in der chemischen Synthese, Halbleiterphysik, Oberflächenphysik, Strukturanalyse, Laserspektroskopie und physikalischen wie chemischen Theorie bei. Bei der Auswahl der teilnehmenden Gruppenleiter wurde dabei auch darauf geachtet, neben den renommierten Professoren, auch sechs Nachwuchswissenschaftlern die Möglichkeit zu geben, ihre wissenschaftliche Karriere durch ihren Beitrag voranzubringen.

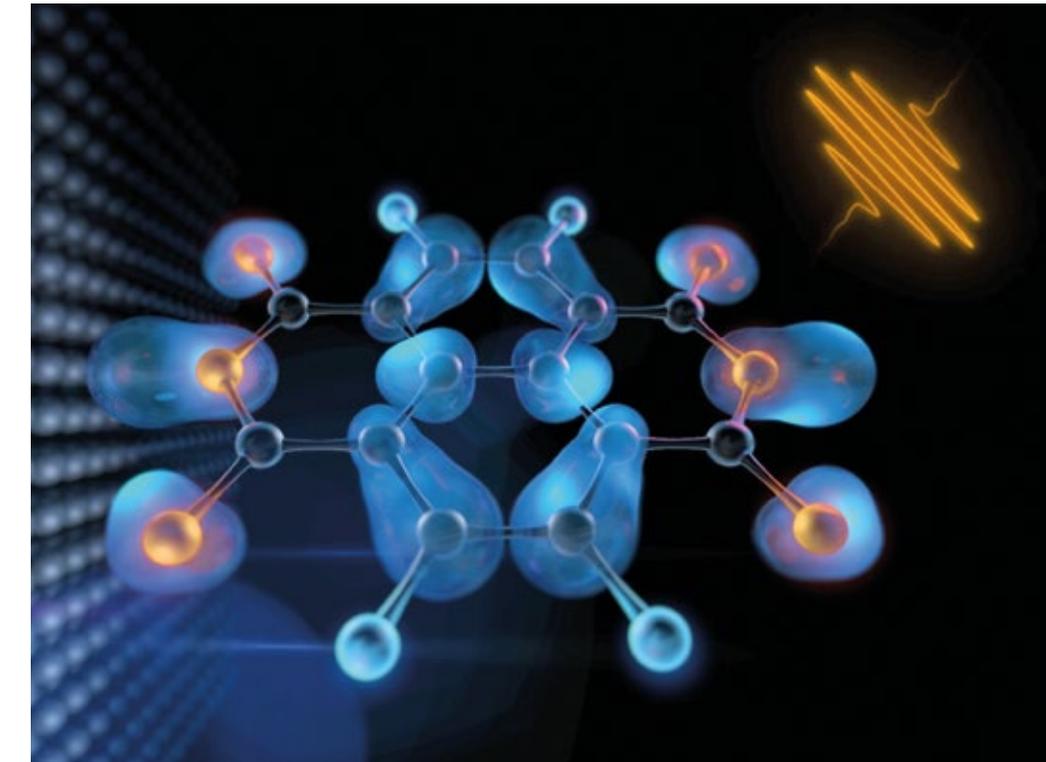


Struktur und Dynamik innerer Grenzflächen

Der SFB gliedert sich in zwei Teile. Im **Arbeitsgebiet A** entwickeln und charakterisieren elf Projekte Modellstrukturen der Schichtsysteme. Da die Grenzflächen in realen Bauteilen oft nicht genau definiert sind, stellen die Forscher idealisierte, speziell präparierte Modellschichtsysteme her und charakterisieren diese auf atomarer Ebene. Die Synthesechemiker stellen beispielsweise wohldefinierte Clusterbausteine oder organische Moleküle bereit. Oder, Physiker präparieren hochgenau abgeschiedene Halbleiter-Heterostrukturen, die im Elektronenmikroskop geprüft werden.

Im **Arbeitsgebiet B** untersuchen weitere sieben Projekte die opto-elektronischen Eigenschaften dieser Modellsysteme. Im Blick steht insbesondere der Ladungstransfer über die Grenzfläche. Die Methoden der Wahl kommen aus der optischen Spektroskopie. Mit ausgeklügelten Messverfahren lassen sich die schwachen Signale der Grenzschicht detektieren. Teilweise erlauben sie eine Zeitauflösung im Bereich von Femtosekunden (Millionstel einer Milliardstel Sekunde).

Der SFB verknüpft in seinen Projekten die chemische Synthese der Grenzflächenmaterialien, den Aufbau der Schichten, die spektroskopischen Untersuchungen und die theoretische Modellierung. „Diese enge Verknüpfung und Rückkopplung von Experiment und Theorie ist für Marburg einmalig“, sagt Materialforscher Wolfgang Stolz, der Halbleiter-Heterostrukturen für den SFB herstellt. Mit Investitionen in die Forschungsinfrastruktur und einer gezielten Personalstrategie hat die Universität ihr Profil in der Grenzflächenforschung geschärft.



Hinzu kommt, dass erst in jüngster Zeit die experimentellen Techniken sowie die Theoriebildung weit genug fortgeschritten sind, um die Grenzflächen auf atomarer Skala untersuchen zu können. Dazu zählen beispielsweise die Transmissions-Elektronenmikroskopie (TEM) für die Strukturaufklärung in Grenzflächen und optische Methoden, um die elektronischen Prozesse tief im Inneren eines Festkörpers aufklären zu können. Für Ulrich Höfer ist daher die Zeit gekommen, die offenen Fragen der Grenzflächenphysik zu klären.

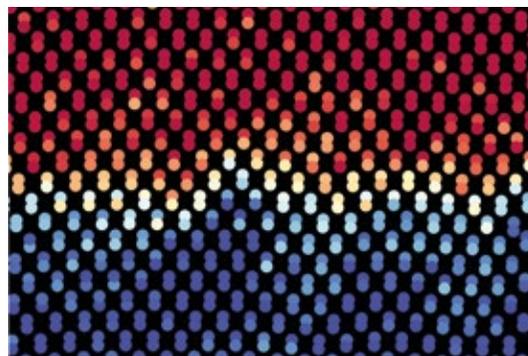


Wissenschaftliche Highlights

Pyramidenbau an der Grenzfläche

Vier Jahre und 174 wissenschaftliche Publikationen später geht der SFB 1083 mit seiner Verlängerung in die nächste Phase. Die Projekte haben sich gewandelt. Aus den Ergebnissen wurden neue Arbeitspakete definiert. Einige Projekte konnten erfolgreich abgeschlossen werden, andere stoßen in neue – beispielsweise 2D – Dimensionen vor. An vier wichtigen Highlights sollen die Fortschritte illustriert werden.

Um Grenzflächeneffekte und deren elektronische Eigenschaften zu untersuchen, wollen und müssen die Forscherinnen und Forscher die Schichten exakt kontrollieren. Im Sinne haben sie dabei immer glatte, in Materialzusammensetzung und -struktur exakt definierte Schichten. Doch manchmal ist die Natur einen Tick komplizierter als die Wissenschaftler erwarten, etwa bei der Materialkombination Silizium und GaP. Einfachen Modellen zufolge sollte sich eine glatte, abrupte Grenzfläche ergeben. Doch ein Bild des Transmissions-Elektronenmikroskops (TEM) ließ die Materialwissenschaftler um Arbeitsgruppenleiterin Kerstin Volz staunen: Das Silizium schien mit regelmäßigen, pyramidenförmigen Erhebungen in das GaP hinein zu wachsen – eine Struktur ähnlich einem Eierkarton.



Genauere Modellierungen von Chemiker Ralf Tonner brachten zu Tage, dass diese „Pyramidenstruktur“ tatsächlich die energiegünstigste Anordnung der Grenzfläche ist. Das Materialsandwich nimmt also auf natürliche Weise die komplizierte Mischstruktur ein. Diese Grenzschicht mit Pyramiden des Siliziums ins GaP umfasst rund sieben Atomlagen.

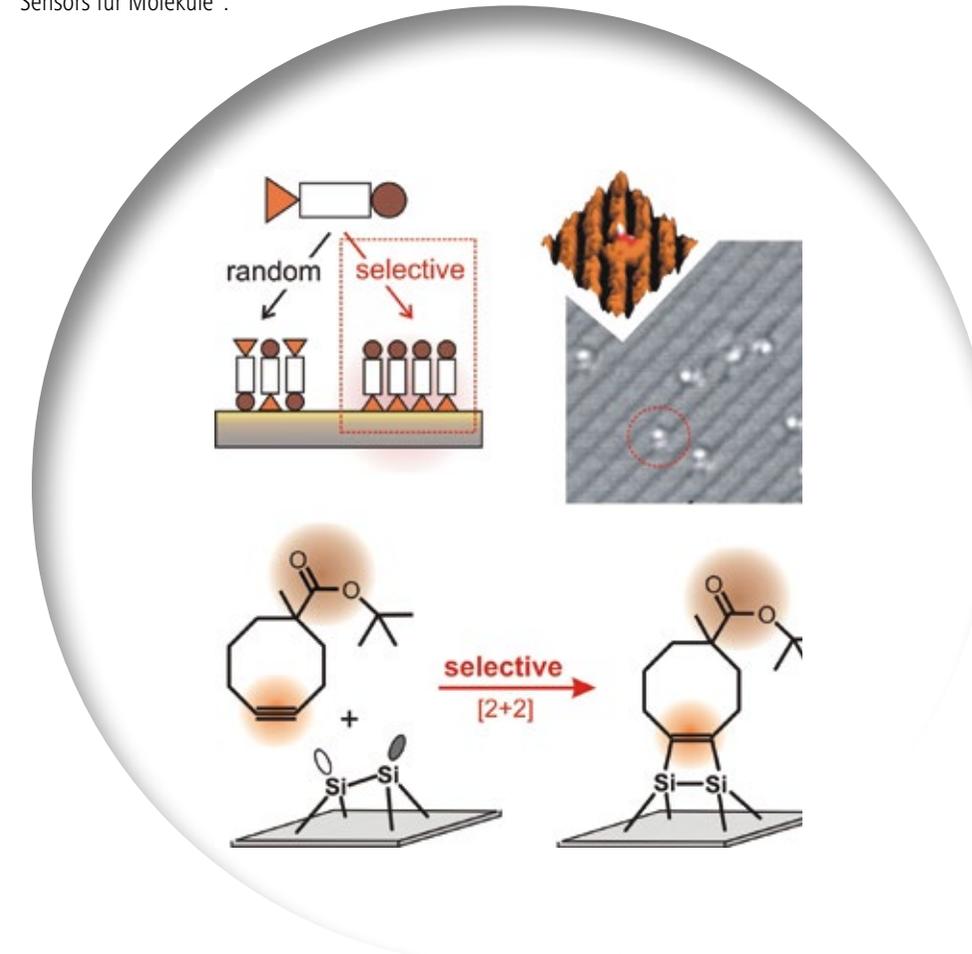
Nun ist die Spektroskopie an solchen nicht idealen Heteroschichten alles andere als einfach. Es gibt zusätzliche, verwischte und überlagerte elektronische Grenzflächenzustände. Die Forscherinnen und Forscher versuchen daher, andere Schichtsysteme von Si/GaP herzustellen, bei denen die Grenzfläche hoffentlich und tatsächlich modellhaft glatt ist. Das könnte bei der Siliziumoberfläche eine andere Kristallisationsebene sein, beispielsweise die (112)-Ebene und nicht die in der industriellen Halbleitertechnik favorisierte (100)-Ebene. Dort sollen die Schichtsysteme wieder ideal glatt sein und eine spektroskopische Analyse erlauben. Es sei denn, die Forscherinnen und Forscher erleben weitere Überraschungen.

Bindungsproblem gelöst

Ein Wunschtraum der Materialwissenschaften ist es, Halbleiter und organische Chemie in den Schichtsystemen miteinander zu verbinden. Die Halbleiter stellen dann den Kontakt zur „Welt der Elektronik“ her. Der chemische Part des Systems stellt die vielen Möglichkeiten zur Funktionalisierung durch den chemischen Molekülbaukasten bereit. Das ist den Chemikern und Physikern im SFB nun gelungen. Die Chemiker um Ulrich Koert haben zunächst mit den sogenannten Cyclooctinen eine Substanzklasse synthetisiert und funktionalisiert, die überhaupt das Potenzial hat, auf hochreaktiven Siliziumoberflächen selektiv zu binden. Die Physiker um Michael Dürr und Ulrich Höfer konnten das Andocken ans Substrat und den selektiven Bindungsprozess spektroskopisch aufklären. Damit können die Forscher erstmals eine Siliziumoberfläche gezielt mit organischen Substanzen beschichten und bedecken – und zwar mit einer festen, kovalenten Molekülbindung.

Zunächst verfügt das Cyclooctin über eine verspannte Dreifachbindung, die sich gern in eine Doppelbindung und eine Bindung ans Silizium aufspaltet. Die Reaktionskinetik an der Siliziumoberfläche präferiert diese Dreifachbindung und lässt andere funktionelle Gruppen des Rings intakt. Diese funktionellen Gruppen sind damit als aktive chemische Bauelemente auf der Oberfläche etabliert, womit die Forscherinnen und Forscher weiterarbeiten können. „Das fundamentale Problem der Anbindung an die Oberfläche ist gelöst“, erklärt Physiker Ulrich Höfer.

Mit diesem Aufbau können die inneren Grenzflächeneigenschaften wie der Ladungstransfer für weitere funktionelle Schichten und Molekülgruppen untersucht werden. „So eine funktionelle Schicht wäre etwa der Prototyp eines Sensors für Moleküle“.



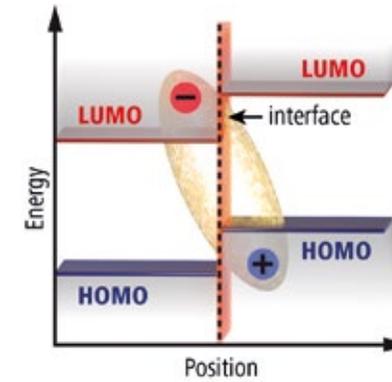
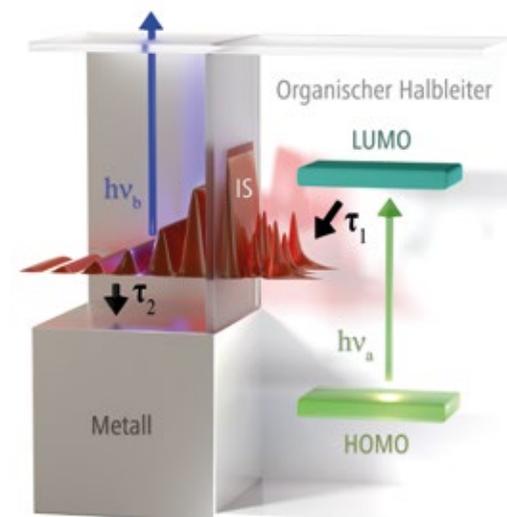
Grenzflächenzustände und der Energietransfer

Dass an der Grenzfläche völlig neuartige Zustände entstehen, die sich teils drastisch von denen der Volumenmaterialien unterscheiden, gehört - auch dank der Vorarbeit der Marburger Forscher - mittlerweile zum allgemein akzeptierten Stand der Forschung.

Wie sich deren Eigenschaften allerdings technisch nutzen und gezielt verändern lassen, ist noch weitestgehend unbekannt und wird daher gezielt im Sonderforschungsbereich untersucht. Die Grenzflächenzustände können dabei verschiedene Funktionen erfüllen. Zum einen besteht hier die Möglichkeit der effektiven Ladungstrennung, die beispielsweise für die Effizienz von Solarzellen von entscheidender Bedeutung ist. Der umgekehrte Prozess wäre die Rekombination positiv und negativ geladener Raumbereiche. Dadurch entsteht aus elektrischem Strom Licht und Leuchtdioden (LED, OLED) werden zum Leuchten gebracht.

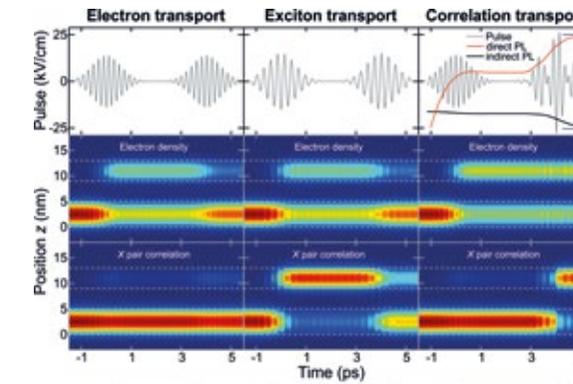
die Geschwindigkeit der Ladungsträgerinjektion an den Grenzflächen der Dünnschichttransistoren (TFT) begrenzt. Die Forscher um Ulrich Höfer haben herausgefunden, dass der sogenannte unbesetzte „Interfacezustand (IS)“, der sich zwischen einer Vielzahl von organischen Molekülen und Metallen ausbildet, einen wichtigen Beitrag zum Energietransfer leisten kann. Besonders effizient erfolgt dieser Transfer in allerdünnsten Schichtsystemen, denen in der kommenden Miniaturisierung organischer Halbleiterbauteile eine immer größere Bedeutung zukommen wird.

Für die Ladungstrennung und Rekombination wiederum sind die „Grenzflächen-Exzitonen“ entscheidend. Zum ersten Mal konnten diese Quasiteilchen, die sich über die Grenzfläche hinaus in unterschiedliche organische Materialien erstrecken, mittels Optischer- und Terahertzspektroskopie selektiv angeregt werden, wodurch eine direkte zeitaufgelöste Vermessung der Entstehung und des Zerfalls möglich wurde.



Die Ergebnisse wurden erst durch die Zusammenarbeit der experimentell arbeitenden Forschergruppen von Gregor Witte, Sangam Chatterjee, Martin Koch und Wolfram Heimbrodt möglich, die sich wiederum mit dem Team um die theoretischen Physiker Stefan Koch und Mackillo Kira zusammengetan haben.

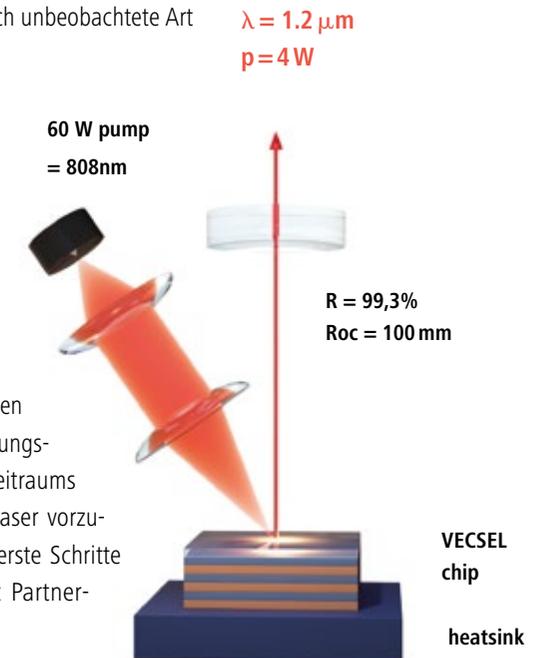
Die experimentellen Beobachtungen wurden in einem theoretischen Modell in bisher nicht gekannter Genauigkeit erklärt, wobei sich praktisch als Nebenprodukt der gemeinsamen Untersuchung eine höchst faszinierende weitere Eigenschaft dieser Grenzflächensysteme ergeben hat. Das theoretische Modell zeigt unmittelbar, dass an der Grenzfläche die quantenmechanische Eigenschaft der Korrelation zwischen Teilchen übertragen werden kann, ohne dass dabei ein effektiver Energie- oder Ladungstransfer stattfinden muss. Eine bisher noch unbeobachtete Art der Informationsübertragung.



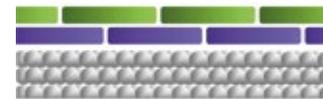
Der Weg zum W-Laser

Es sind auch diese speziellen elektronischen Zustände, die Grenzflächenexzitonen, die im Falle des sogenannten W-Lasers zum Leuchten gebracht werden können. Der W-Laser ist eine Sandwich-Konstruktion verschiedener Halbleiterschichten. Durch deren Aufbau und das sogenannte „Band Alignment“ lässt sich der Laserübergang gezielt steuern. Derzeit leuchtet der Laser bei 1 bis 2 Mikrometern, was üblichen Wellenlängen in der Telekommunikation entspricht. Doch auch Wellenlängen über 2 Mikrometer, die kommerziell noch nicht erschlossen sind, lassen sich erreichen. Damit könnten etwa Infrarot-Sensoren gebaut werden.

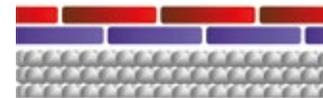
Für die Grundlagenforschung ist der Laserübergang im W-Laser interessant, da er nur bei Grenzflächen mit einer bestimmten Rauigkeit funktioniert. „Glatte“ Grenzflächen funktionieren nicht. Ziel der Forschungsarbeiten ist, bis Ende des Förderzeitraums einen ersten Prototyp für den W-Laser vorzustellen und gegebenenfalls sogar erste Schritte zur industriellen Anwendung mit Partnerunternehmen zu machen.



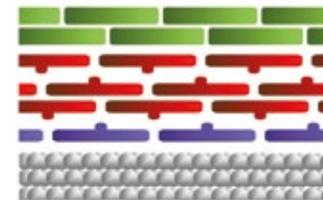
PTCDA/PTCDA/Ag(111)



CuPc/PTCDA/Ag(111)



PTCDA/TiOPc/TiOPc/Ag(111)

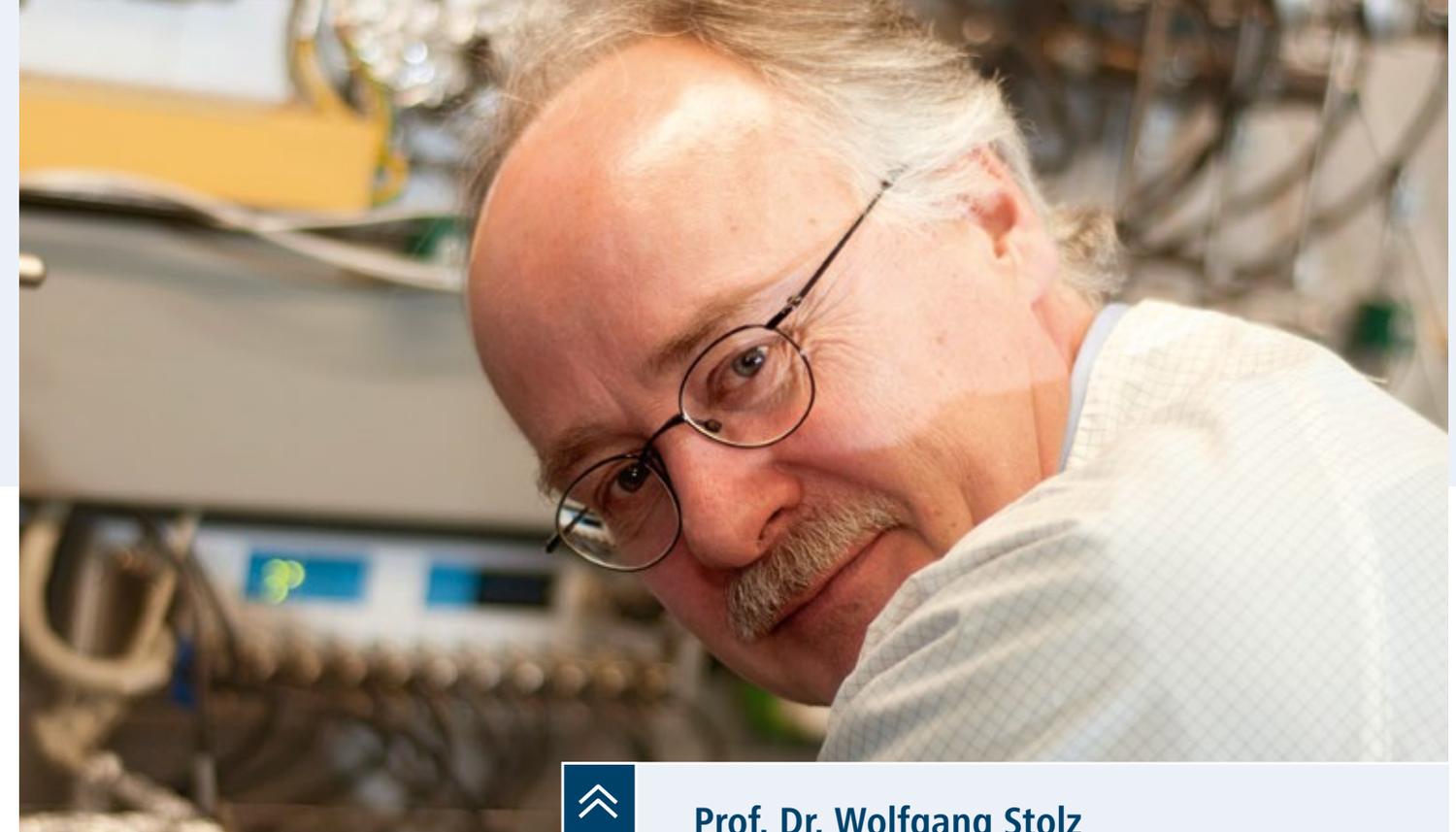


Zum anderen müssen Ladungen aber auch schnell über Grenzflächen hinweg transportiert werden, ohne dass die Energie umgewandelt wird und damit für die Anwendung verloren geht. Die maximale Auflösung von Bildschirmen beispielsweise, die durch die Ansteuerfrequenz der einzelnen Bildpunkte festgelegt ist, wird derzeit durch

Metallorganische Gasphasenepitaxie von Halbleiter-Heterostrukturen und -grenzflächen

Moderne mikro- und optoelektronische Bauelemente bestehen meist aus strukturierten Halbleiter-Schichtsystemen, die in hoher Perfektion nacheinander hergestellt werden. Die Arbeitsgruppe von Wolfgang Stolz nutzt im Struktur- und Technologieforschungslabor der Universität Marburg den vorhandenen Maschinenpark für die Herstellung und Charakterisierung von Modellsystemen aus Heterostrukturen – Halbleiterschichten verschiedener Zusammensetzung wie Silizium, GaAs, GaP und einer Vielzahl weiterer vielkomponentiger Materialien. Pro Sekunde scheidet die Metallorganische Gasphasenepitaxie (MOVPE) eine Atomlage ab. Durch die hohe Präzision können die Forscherinnen und Forscher die Schichtsysteme sehr gut kontrollieren und mit den physikalischen Eigenschaften „spielen“. Interessant ist beispielsweise, wie unterschiedliche Gitterkonstanten, verspannte Zwischenschichten, polare und nicht-polare Komponenten den Schichtaufbau modifizieren und die Grenzflächeneigenschaften beeinflussen.

„Wir versuchen, die Strukturen so perfekt wie möglich herzustellen. Jede Imperfektion kann die interessanten Effekte an der Grenzfläche überdecken“, sagt Wolfgang Stolz. Beim Aufdampfen von GaP auf einer perfekt glatten Siliziumunterlage haben die Forscherinnen und Forscher beispielsweise überrascht festgestellt, dass sich die Grenzschicht komplett umlagert. In einer Kontaktschicht von sieben Atomlagen Dicke bilden sich unerwartete pyramidenförmige Strukturen. Mit dem Elektronenmikroskop und anderen Methoden verifizierten die Forscherinnen und Forscher das neue Phänomen. Die Theoretiker im Sonderforschungsbereich (SFB) konnten die thermodynamischen Prozesse beim Abscheiden sowie die chemischen Bindungen in der Grenzschicht rasch als energetisch günstig beschreiben und verständlich machen. Stolz: „Diese Interaktion der Herstellung von Modellsystemen, der experimentellen Analyse und theoretischen Rückkopplung zeichnet den SFB in Marburg aus.“ Für die verschiedenen Arbeitspakete im SFB stellt sein Team Hunderte von Halbleiter-Schichtstrukturen und Modifikationen her und untersucht diese mit verschiedenen Analysemethoden.



Prof. Dr. Wolfgang Stolz
Philipps-Universität Marburg
Struktur- & Technologieforschungslabor

(+49) 6421 28-25696

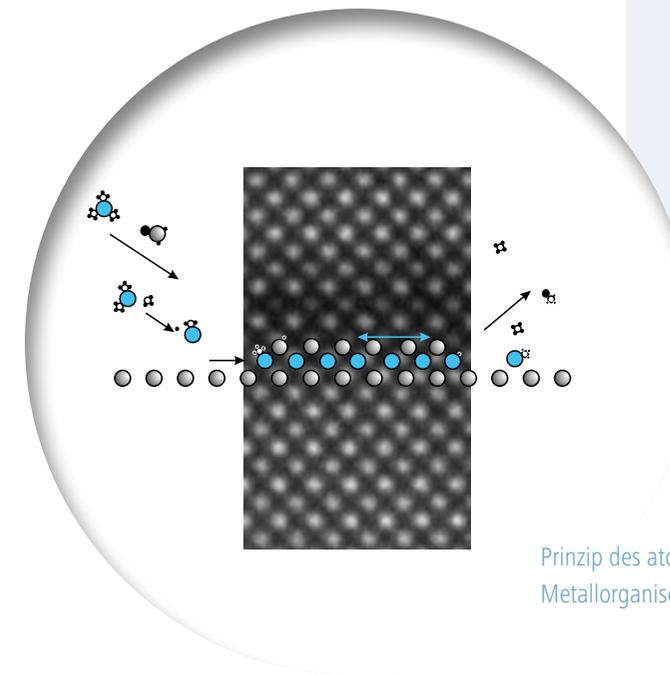
wolfgang.stolz@physik.uni-marburg.de

EXPERTISE:

Epitaktisches Wachstum von III/IV Halbleiter Hetero- und Nanostrukturen, deren strukturelle, elektrische und optoelektronische Charakterisierung, Halbleitertechnologie, optoelektronische Anwendungen

Materialien: Anorganik/Anorganik

Methoden: Epitaktisches Wachstum, Strukturanalyse, Optische Spektroskopie



Prinzip des atomar kontrollierten Schichtaufbaus in der Metallorganischen Gasphasenepitaxie.

Organisch/anorganische- und organisch/organische-Grenzflächen: Struktur und Ladungsträgertransport



Um die komplexe Struktur organischer Bauelemente, etwa organischer Solarzellen, zu verstehen und deren Leistungsfähigkeit zu verbessern, braucht es ein grundlegendes Verständnis einfacher Modellsysteme. Dazu zählen „simple“ Schichtstrukturen von organischen Molekülen auf anorganischen Trägersubstraten, die in der Arbeitsgruppe von Gregor Witte hergestellt und charakterisiert werden. Die kontrollierte Herstellung kristalliner Dünnschichten aus Molekülen wie Acenen, Phthalocyaninen oder Fullerenen mit definierter Molekülorientierung, sowohl auf Metall- als auch Isolatorsubstraten, beherrschen in Deutschland nur wenige Arbeitsgruppen.

„Die Moleküle sind wie Schüttgut, das wir auf eine Oberfläche bringen. Wir nehmen uns der Herausforderung an, einzelne Schichten, die nur durch „schwache“ van-der-Waals-Kräfte gebunden sind, in kristalline Ordnung zu bringen“, sagt Witte. Die Forscher studieren dann die Wechselwirkungen von Dünnschicht und Substrat, aber auch die Grenzflächeneffekte übereinander gestapelter Molekülschichten, die als Donor oder Akzeptor fungieren. Durch die definierten Strukturen können die Forscher den Theoretikern exakte Daten liefern, um strukturabhängige Eigenschaften zu modellieren.

In einem weiteren Experiment bringen die Forscher die Molekülschichten auf 2D-Materialien wie MoS₂ oder h-BN auf. Die starke Kopplung mit dem Substrat – etwa einem Metall – ist durch die schwache Bindung mit dieser Zwischenlage fast aufgehoben, so dass Grenzflächeneffekte in Schichtsystemen noch deutlicher zutage treten. Durch Multilagengestapelte verschiedener Materialien (Oxide oder Metalle als Substrate, organische Moleküle und TMDCs als Schichten) und der Variation der Schichtdicke wollen die Forscher herausfinden, wie Schichtabfolgen und -dicken die elektro-optischen Eigenschaften der Grenzfläche steuern.

Mittels Rastersonden-Mikroskopen und Röntgenstrahlen, teils im eigenen Labor, teils am Berliner Beschleuniger BESSY II, untersuchen die Forscher die Schichten. Eine neue Methode tritt hinzu: Aus der Vermessung von Kennlinien organischer Dünnschichttransistoren kann das Forschungsteam den Ladungstransport durch die jeweiligen Schichtsysteme und Grenzflächen bestimmen. „Die elektrischen Effekte wollen wir dann mit der Struktur korrelieren“, erklärt Witte.

Prof. Dr. Gregor Witte
Philipps-Universität Marburg
Molekulare Festkörperphysik

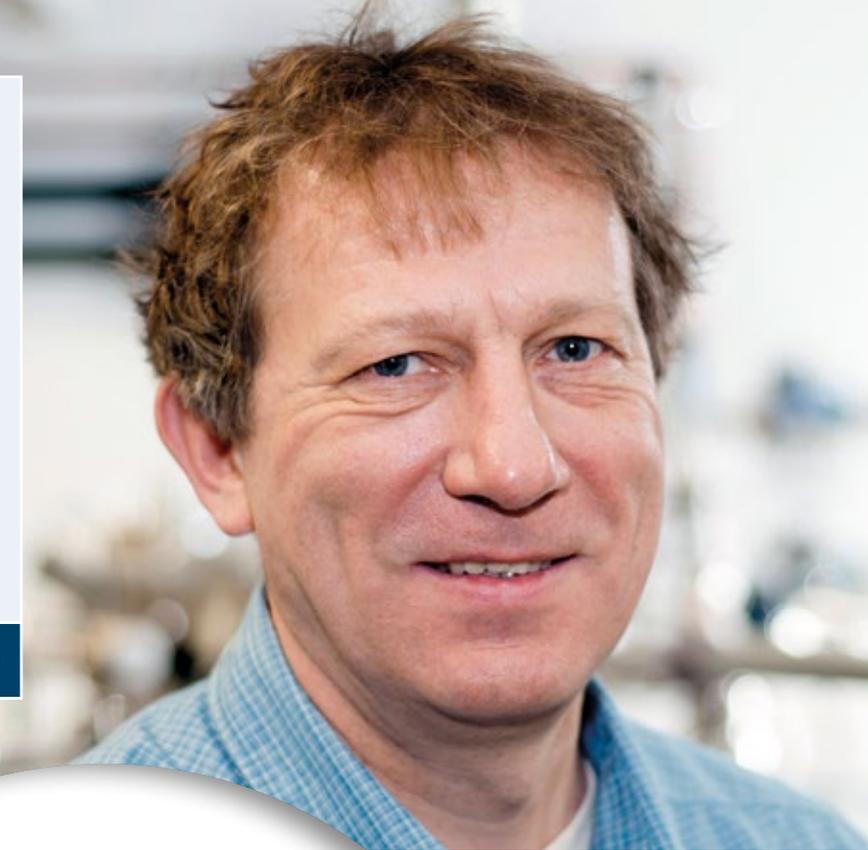
(+49) 6421 28-21384
gregor.witte@physik.uni-marburg.de

EXPERTISE:

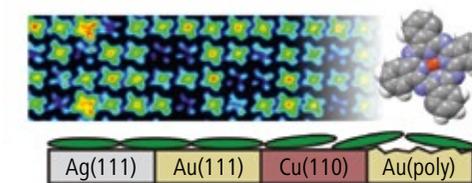
Organische Halbleiterschichten, physikalische Chemie der Adsorbate, templat- und grenzflächenabhängiges Dünnschicht-Wachstum, Röntgenabsorptions-Spektroskopie

Materialien: Metall/Organik, Anorganik/Organik, Organik/Organik

Methoden: Strukturanalyse, Epitaktisches Wachstum

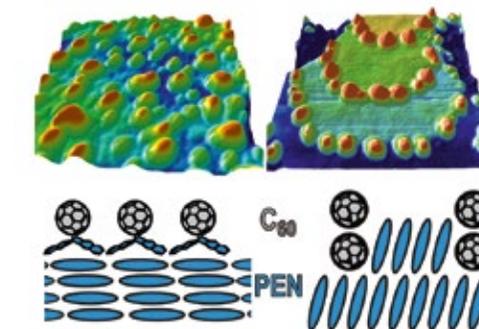


Inorganik/Organik Grenzflächen



Oben: Bei der Kombination verschiedener Materialien in organischen Heterostrukturen ist die Strukturbildung äußerst komplex. Sowohl die Grenzflächenstruktur, als auch die chemische Wechselwirkung der Moleküle miteinander, hängt unter anderem von der relativen Orientierung der Moleküle an der Grenzfläche ab.

Organik/Organik Grenzflächen

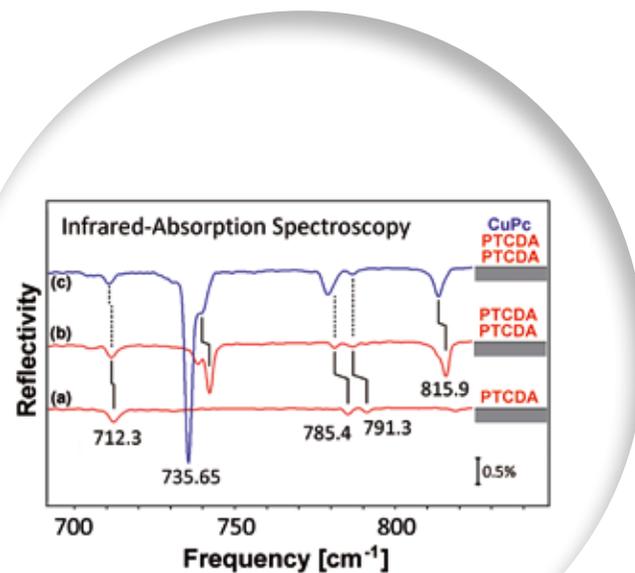


Oben: Auf verschiedenen Metalloberflächen können hochgeordnete Lagen von exakt einer Moleküldicke hergestellt werden. Dies ermöglicht die gezielte Kontrolle über die Grenzflächendipole dieser Hybrid-Systeme.

Grenzflächen organischer Heteroschichtsysteme: Struktur und Vibrationsanregungen

Organische Modellstrukturen auf Metallen, wie z. B. Silber oder Gold, präpariert und charakterisiert die Arbeitsgruppe von Peter Jakob. Zunächst scheiden die Forscherinnen und Forscher die organischen Moleküle – off-the-shelf Substanzen wie NTCDA oder PTCDA, oder speziell synthetisierte Phthalocyanine – per Molekülstrahlen im Ultrahochvakuum ab. Über die Prozessparameter, wie etwa Temperatur und Substanzmenge, kann auf die Anordnung der Moleküle – ob gerade aufliegend oder verkantet schräg stehend – Einfluss genommen werden; ebenso auf die relative Lage der Moleküle bei Mehrschichtsystemen. Wie sich die Schichtsysteme mikroskopisch ausgebildet haben, überprüfen die Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler mit der Infrarot-Spektroskopie und über die Elektronenbeugung LEED (Low Energy Electron Diffraction).

Für die anderen Arbeitsgruppen im SFB bereitet das Team um Peter Jakob die Modellproben vor. „Wir können nahezu beliebig komplexe Schichtsysteme präparieren“, sagt Peter Jakob. In einem Projekt deponieren die Forscherinnen und Forscher auf das Silbersubstrat mit Zwischenschicht PTCDA eine Lage Titanyl-Phthalocyanin.



Vergleich der Infrarotspektren unterschiedlicher molekularer Schichten, deponiert auf einer Ag(111) Oberfläche:

(a) PTCDA – Monolage; (b) PTCDA – Bilage; (c) CuPc/PTCDA – Heteroschicht.



Prof. Dr. Peter Jakob
Philipps-Universität Marburg
Oberflächenphysik

(+49) 6421 28-24328

peter.jakob@physik.uni-marburg.de

EXPERTISE:

Vibrationsspektroskopie an Oberflächen und Grenzflächen, Oberflächenchemie, Kinetik von Oberflächenprozessen, organische Molekularstrahldeposition

Materialien: Metall/Organik, Organik/Organik

Methoden: Strukturanalyse, Epitaktisches Wachstum, Optische Spektroskopie

Das Molekül sieht aus wie ein Kleeblatt, aus dessen Mitte das Sauerstoffatom wie ein Dorn heraus ragt. Auf diese Schicht rastet kopfüber eine zweite Phthalocyanin-Schicht ein. Die Physiker suchen dabei stets nach geeigneten Rezepturen, um stabile Schichten zu erzielen, die dann wiederum Grundlage weiterer Schichtstrukturen sein können. Da die Moleküle je nach Anordnung unterschiedlich schwingen, und dies durch theoretische Studien auch modelliert werden kann, können die Forscherinnen und Forscher den Strukturaufbau der Schichten anhand der Schwingungsbanden im Infrarot-Spektrum verifizieren und Präparationsbedingungen entsprechend modifizieren.

Reaktivität, Energetik und Struktur von vergrabenen Organik/Metall-Grenzflächen

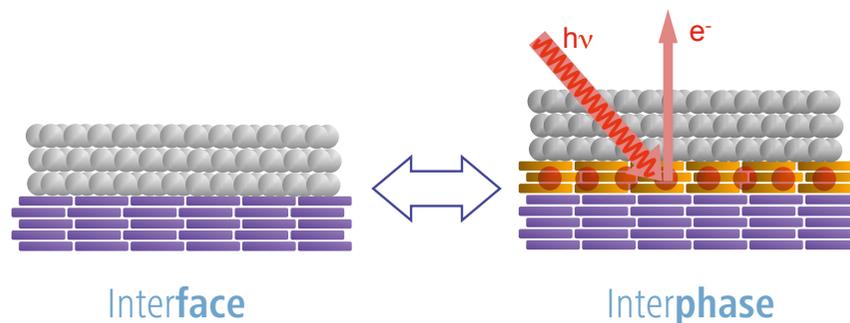
Die mikroskopische Struktur und Dynamik von organisch-metallischen Grenzflächen spielt insbesondere beim Kontaktieren organischer Halbleiter (in Solarzellen oder Leuchtdioden) eine entscheidende Rolle. Das Team von Michael Gottfried und Martin Schmid untersucht die physikalisch-chemischen Prozesse in der Kontaktzone: Wie verhält sich die organische Schicht gegenüber dem Metall? Welche Reaktionen laufen ab? Und wie ändert sich der chemische Zustand, wie etwa die Oxidationsstufe der Reaktionspartner? Dafür setzen sie reaktionsfreudige Metalle wie Calcium, Magnesium oder Kobalt ein.

Beim Bedampfen der organischen Modellsubstanz Tetraphenylporphyrin mit Kobalt diffundiert beispielsweise das Metall in die organische Schicht und reagiert zu einem Metallkomplex, der eine fünf bis sechs Moleküllagen dicke

Zwischenschicht (Interphase) ausbildet. „Das ist ein gutes Modellsystem, mit dem wir die Bildung der wichtigen Interphase verstehen können“, sagt Michael Gottfried. Photoelektronenspektroskopie mit harter Röntgenstrahlung, durchgeführt am Berliner Elektronensynchrotron BESSY II, liefert den Forscherinnen und Forschern ein genaues Tiefenprofil des Schichtsystems.

Mit der Nanojoulekalorimetrie will das Team außerdem die Bindungsenergien der Metallatome an die Oberfläche der organischen Modellsubstanz messen. „Wir wollen dann schrittweise die Komplexität unserer Modellsysteme steigern, aber die volle Kontrolle über alle Eigenschaften behalten“, sagt Martin Schmid. Die Forscher betrachten dazu gestufte Grenzflächen als einfaches Modell für Defekte sowie legierte Materialsysteme, etwa aus Silber

Atomar abrupte Grenzfläche (Interface, links) und Ausbildung einer Reaktionszone (Interphase) zwischen Metall und organischer Phase. Photoelektronenspektroskopie mit harter Röntgenstrahlung gibt Auskunft über die Chemie der Interphasenbildung.



Prof. Dr. Michael Gottfried Philipps-Universität Marburg Physikalische Chemie

(+49) 6421 28-22541
michael.gottfried@chemie.uni-marburg.de

EXPERTISE:

Oberflächenchemie, Modellkatalyse, organische und organometallische Dünnschichten, Photoelektronenspektroskopie

Materialien: Metall/Organik

Methoden: Strukturanalyse, Epitaktisches Wachstum



und Gold. „Wir machen hier als Chemiker den Schritt von stark abstrahierten Modellsystemen in Richtung realer Systeme“, erklärt Schmid. Mit diesen realitätsnahen Materialsystemen wollen die Forscher besser verstehen, wie zukünftige Bauelemente optimiert werden können. Neben Präparation und Charakterisierung der Schichtsysteme studiert die Arbeitsgruppe daher auch, wie sich die reaktiven Prozesse an der Grenzfläche steuern – etwa verstärken oder unterbinden – lassen.

Dr. Martin Schmid Philipps-Universität Marburg Physikalische Chemie

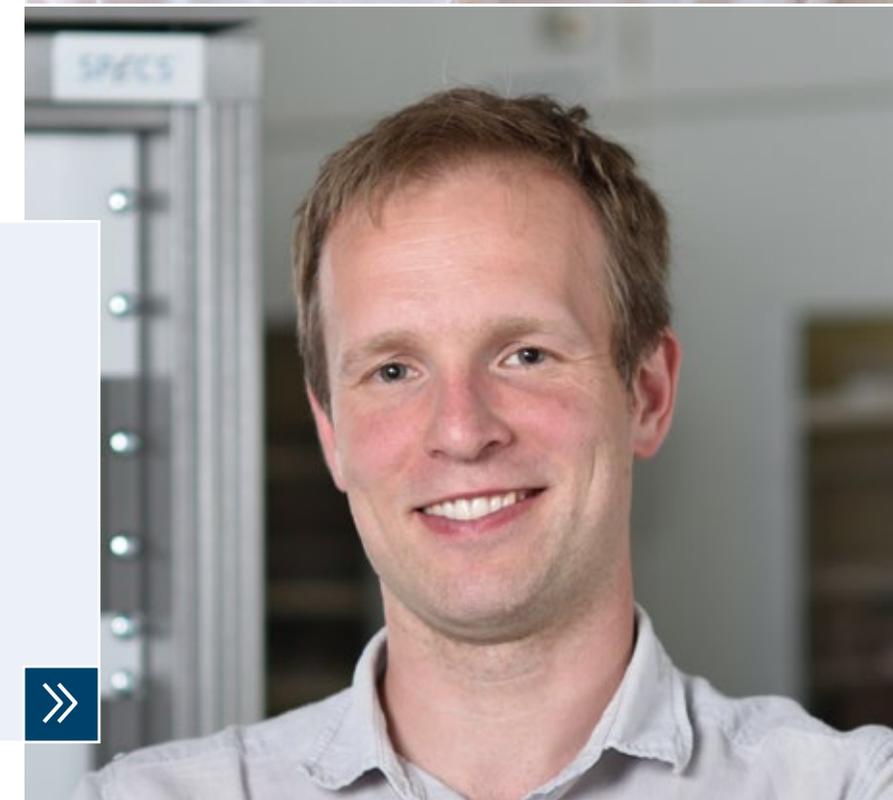
(+49) 6421 28-22543
schmidm5@staff.uni-marburg.de

EXPERTISE:

Oberflächenchemie, organische und organometallische Dünnschichten, Photoelektronenspektroskopie, Rastertunnelmikroskopie

Materialien: Metall/Organik

Methoden: Strukturanalyse, Epitaktisches Wachstum

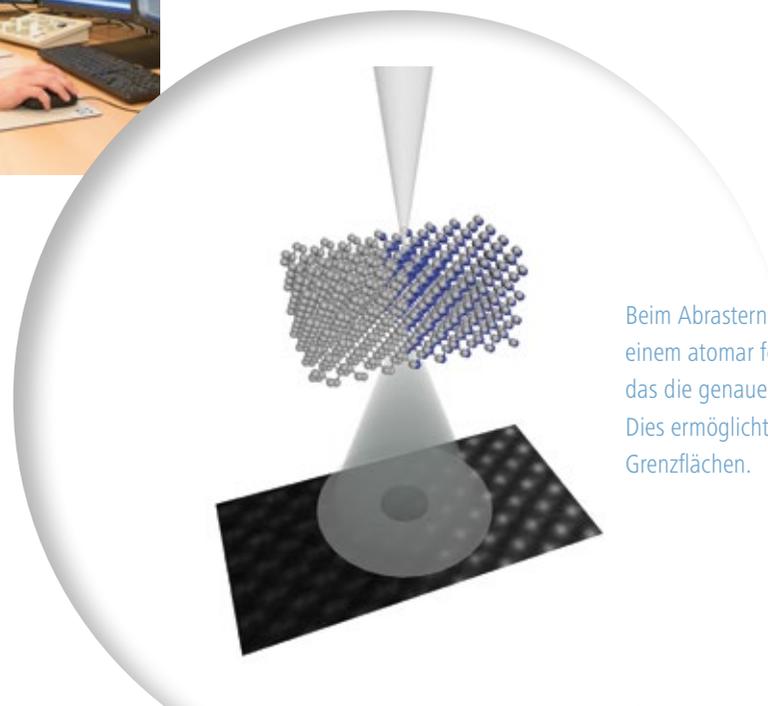


Atomar aufgelöste Struktur vergrabener Grenzflächen zwischen Festkörpern



Mit ihren Methoden schaut die Arbeitsgruppe von Kerstin Volz den Materialsystemen gewissermaßen unter die Motorhaube. Zentrales Instrument ist das Transmissions-Elektronenmikroskop (TEM). Damit lassen sich Festkörper atomar durchleuchten. Um eine hohe Grenzflächenempfindlichkeit zu erreichen, bedarf es einer äußerst präzisen Probenvorbereitung. Zunächst stellen die Forscherinnen und Forscher der verschiedenen Ar-

beitsgruppen des SFB ihre Schicht-Modellsysteme her. Die Proben werden anschließend geschliffen und weiter mit Ionenstrahlen gedünnt. „Die Probe muss sehr dünn sein. Das ist die hohe Kunst“, sagt Kerstin Volz. Der auf atomare Dimensionen fokussierte Elektronenstrahl bewegt sich parallel zur Grenzschicht durch die dann nur wenige Hundert Atomlagen dicke Probe und rastert den gesamten Schichtverlauf ab.



Beim Abrastern der hauchdünn geschnittenen Schichtsysteme mit einem atomar feinen Elektronenstrahl ergibt sich ein Transmissionsbild, das die genaue Position der einzelnen Atome im Kristallgefüge verrät. Dies ermöglicht die Einsicht in die mikroskopische Struktur vergrabener Grenzflächen.

Prof. Dr. Kerstin Volz
Philipps-Universität Marburg
Struktur- & Technologieforschungslabor

(+49) 6421 28-22297
kerstin.volz@physik.uni-marburg.de

EXPERTISE:

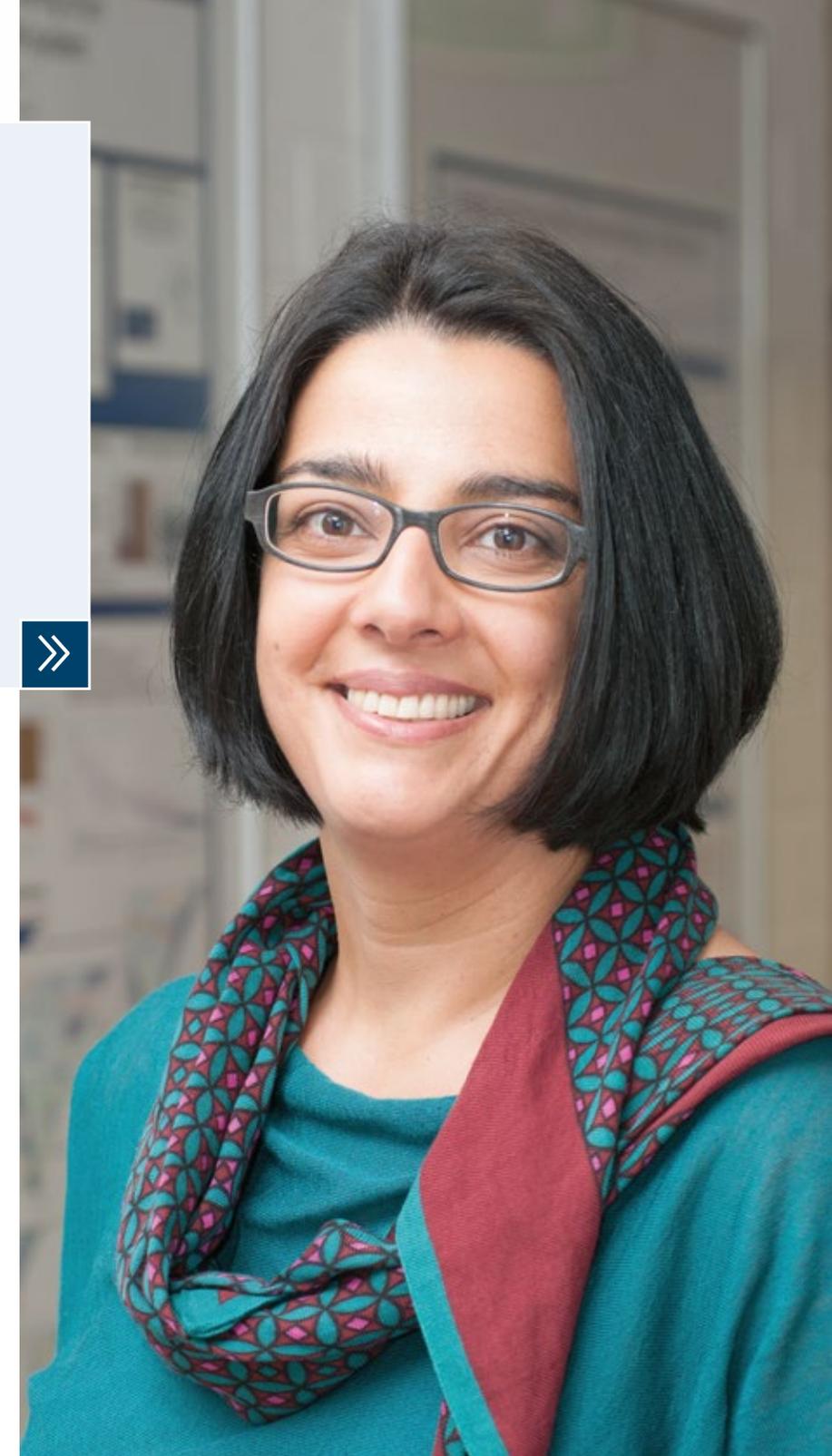
Strukturanalyse, Transmissionselektronenmikroskopie, Epitaktisches Wachstum von Halbleiterstrukturen, strukturelle, optische und Wachstumskorrelation von funktionalen Materialien

Materialien: Anorganik/Anorganik, Anorganik/Organik

Methoden: Strukturanalyse, Theorie/Modellierung



Wichtige Fragestellungen sind, wie sich die Atome im Grenzschichtgefüge anordnen – welches Verhalten wird intrinsisch durch das Material vorgegeben und welchen Einfluss spielt die Präparationsart. Kerstin Volz betrachtet Halbleitermaterialien und deren Heterostrukturen etwa Silizium, GaP, oder (GaIn)As, die sich beispielsweise in den elektrischen Eigenschaften (Polarität) und Struktur (Gitterabstände) unterscheiden. Interessant ist dann, wie sich die Grenzflächen in Abhängigkeit dieser Parameter bilden. Wichtiges Arbeitsgebiet ist auch, die Empfindlichkeit des Rastertransmissions-Elektronenmikroskops (STEM) und die Modellierung immer weiter zu verbessern, um noch mehr Informationen aus den experimentellen Aufnahmen zu erhalten.



Gemeinsame Beschreibung von chemischer Bindung und Wechselwirkungen an Anorganik/Organik-Grenzflächen mittels Dichtefunktionaltheorie



Mit ihren theoretischen Methoden können die Forscher der Nachwuchsgruppe von Ralf Tonner genau beschreiben, wie sich organische Moleküle auf Oberflächen verhalten. Im Fokus stehen dabei die Anordnung in der Oberflächenschicht und die Bindungstypen, etwa Van-der-Waals-Kräfte oder kovalente chemische Bindungen. Aus diesen „*ab initio*“-Simulationen leiten die Chemiker auch die elektronischen Eigenschaften der Grenzflächen ab, die von Physikern mit spektroskopischen Methoden untersucht und im Wechselspiel von Theorie und Experiment verifiziert werden können.

Die Modelle helfen den Synthesechemikern, die Moleküle so zu funktionalisieren, dass diese zielsicher ihren Ort auf der Oberfläche finden und beispielsweise keine unerwünschten Nebenreaktionen stattfinden. „Wir untersuchen auch, ob und wie Verfahren der Klick-Chemie funktionieren, um die nächste Lage an organischen Molekülen anzubinden“, sagt Tonner.

In einem weiteren Teilprojekt schauen sich die Chemiker elektronische Zustände an HL-Grenzflächen (III/V-Halbleiter auf Silizium) an, die überraschend in der 1. Förderperiode des SFB 1083 gefunden wurden. Denn: Der im Modellsystem GaP/Si gefundene Grenzflächenzustand könnte für Halbleitergrenzflächen ein allgemeines Phänomen sein.

In Zukunft wollen die Forscher weitere elektronische und dynamische Effekte in ihre Modelle einbeziehen, um den experimentellen Disziplinen Vorhersagen zu liefern. Es klingt schon verrückt: Nur auf Basis von Formeln und Gedankenarbeit sowie der Hilfe leistungsstarker Großrechner errechnen die Theoretiker ein Bild, das der Experimentator dann im Tunnelmikroskop oder als spektroskopische Messkurve sieht.

PD Dr. Ralf Tonner
Philipps-Universität Marburg
Theoretische Oberflächenchemie

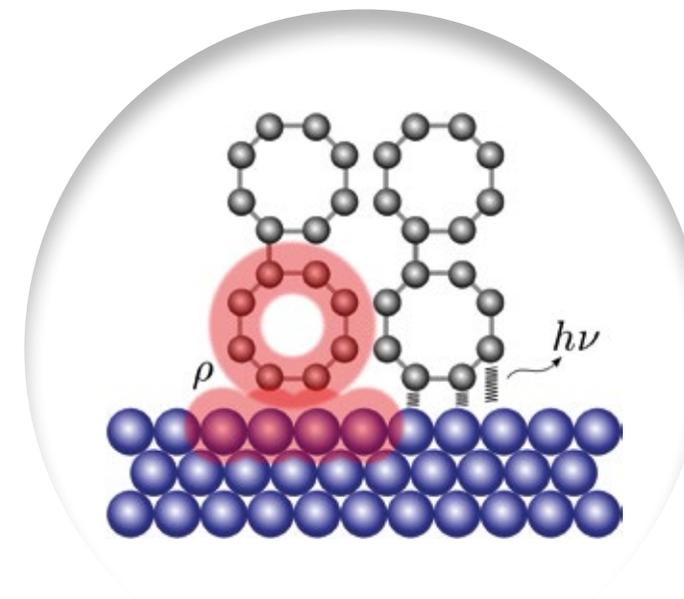
(+49) 6421 28-25418
ralf.tonner@chemie.uni-marburg.de

EXPERTISE:

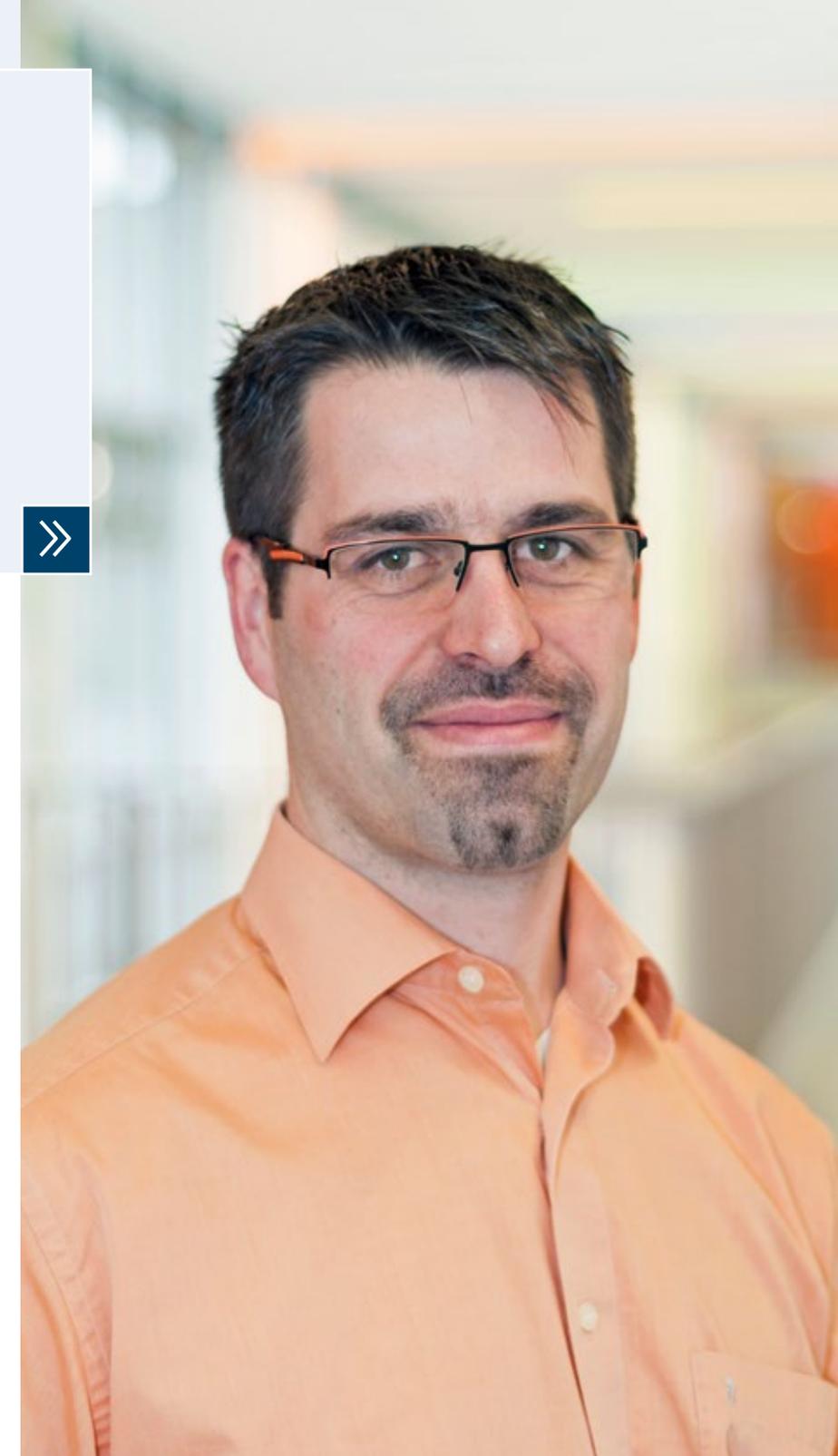
Computerchemie, Dichtefunktionaltheorie, Oberflächenchemie, Anorganische Chemie, Chemische Bindung, Molekülkristalle

Materialien: Anorganik/Organik, Anorganik/Anorganik

Methoden: Theorie/Modellierung

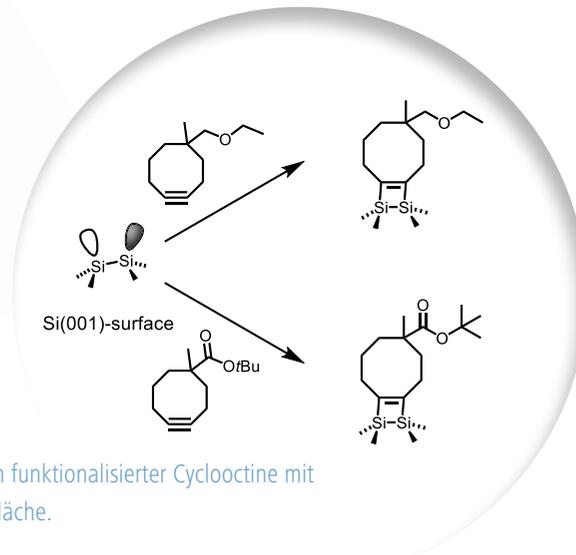


Schichten organischer Moleküle auf Halbleiter-Oberflächen bieten vielfältige Ansätze zum Verständnis elektronischer Effekte und chemischer Reaktivitäten im Grenzflächen-Aufbau.



Organische Moleküle als Bausteine für die Synthese innerer Grenzflächen

Ein wichtiger wissenschaftlicher Meilenstein in der ersten Förderperiode des SFBs war die erfolgreiche Kontaktierung, also die kovalente chemische Anbindung, von funktionalisierten organischen Molekülen auf der hochreaktiven Siliziumoberfläche. Das gelang durch die direkte Kooperation von Chemikern (Arbeitsgruppe Ulrich Koert, Marburg) und Physikern (Arbeitsgruppen Michael Dürr, Gießen und Ulrich Höfer, Marburg). Als Materialsystem bedeutet die „Organik auf Halbleitern“ einen Durchbruch: „Es verbindet die Welt der Computerelektronik mit der funktionellen Gestaltungsvielfalt der organischen Chemie“, erklärt Michael Dürr.



Selektive Reaktion funktionalisierter Cyclooctine mit der Si(001)-Oberfläche.

Im Fokus steht hier das Molekül Cyclooctin, ein Ring aus acht Kohlenstoffatomen mit einer gespannten Dreifachbindung, die besonders reaktiv ist. Die Chemiker und Physiker haben nun den Reaktionsmechanismus von Cyclooctin auf der Siliziumoberfläche aufgeklärt und insbesondere gezeigt, dass Cyclooctin selektiv mit seiner Dreifachbindung an die Halbleiteroberfläche anbindet.

Jetzt können die Forscherinnen und Forscher aufgereichte Cyclooctinmoleküle auf der Oberfläche anbinden und diese weiter funktionalisieren. „Durch die Substituierung von Molekülgruppen können wir beispielsweise Dipolmomente erzeugen und die Ausrichtung im organischen Film manipulieren“, sagt Ulrich Koert. Jede weitere Funktionalisierung mit Molekülen bestimmter elektro-chemischer Eigenschaften entspricht dann gewissermaßen einer eigenen Grenzflächenschicht. Die Chemiker und Physiker können durch die chemische Synthese diese Schichten designen und die Schicht- und Grenzflächeneigenschaften z.B. mit spektroskopischen Methoden (B2 Chatterjee, Gießen; B5 Höfer/Mette, Marburg) vermessen. Die äußerste Schicht hätte mit geeigneter Funktionalisierung auch einen aktiven Sensorcharakter und könnte in elektronischen Bauteilen eingesetzt werden – doch das ist die Zukunft.

Prof. Dr. Ulrich Koert Philipps-Universität Marburg Organische Chemie

(+49) 6421 28-26970
koert@chemie.uni-marburg.de

EXPERTISE:

Organische Synthese komplexer Moleküle (Naturstoffe, Funktionsstoffe, Ionenkanäle, molekulare Schalter), Entwicklung selektiver und effizienter Synthesemethoden

Materialien: Anorganik/Organik, Organik/Organik

Methoden: Chemische Synthese, Epitaktisches Wachstum



Prof. Dr. Michael Dürr Justus-Liebig-Universität Gießen Experimentelle Physik

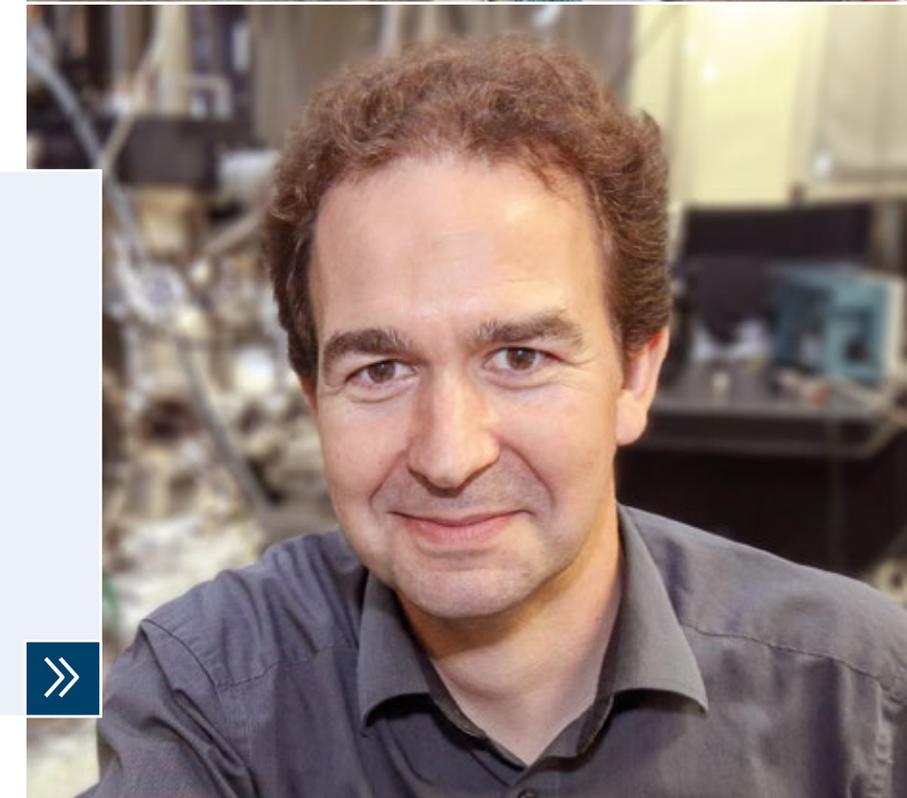
(+49) 641 99-33490
michael.duerr@ap.physik.uni-giessen.de

EXPERTISE:

Experimentalphysik, Reaktionsdynamik an Halbleiteroberflächen, Rastertunnelmikroskopie, Massenspektrometrie

Materialien: Anorganik/Organik, Organik/Organik

Methoden: Strukturanalyse



Synthese und Eigenschaften von molekularen anorganisch/anorganisch/organischen Multilayer-Clustern

Die Spezialität der Arbeitsgruppe von Stefanie Dehnen sind Cluster mit definiertem Aufbau: Die für den SFB synthetisierten Cluster bestehen immer aus einem Kern und zwei darum herum angeordneten Hüllen mit jeweils anderer chemischer Zusammensetzung. Sie beinhalten in molekularer und damit miniaturisierter Weise innere Grenzflächen, was ihnen Modellcharakter für ausgedehnte Festkörper verleiht. Der Vorteil: Im molekularen Cluster sind Art und Position der darin enthaltenen Atome sehr genau bekannt. Damit lassen sich seine Eigenschaften von theoretischen Chemikern genau berechnen. Das elektronische Verhalten, optische Eigenschaften sowie chemische Reaktionen lassen sich mit den im Experiment gefundenen Daten vergleichen. Spannend für die Forscher ist insbesondere, wie sich diese Modelle im Vergleich zu den Festkörpergrenzflächen verhalten.

Im Prinzip weisen die Cluster gleich zwei Grenzflächen auf: Innen ein Kern aus zwei bis drei Atomsorten, deren Kombinationen in halbleitenden Materialien zu finden sind - darum herum eine organische Hülle mit Bindungstaschen für Metallatome. Diese können andocken und die zweite Hülle bilden. „Wir können aber auch noch weitere Liganden anbinden oder alternativ die erste Hülle aus einem anderen anorganischen Material gestalten, das von einer zweiten Hülle aus organischen Liganden umgeben ist“, sagt Stefanie Dehnen. Anhand der definierten Clusterstruktur wollen die Forscherinnen und Forscher die inneren Grenzschichten auf atomarer und molekularer Skala verstehen. Interessant ist auch, wie sich die Prozesse innerhalb eines Clusters und zwischen Nachbarclustern in kondensierter Phase unterscheiden. Im Zentrum der Arbeit stehen die Synthese der Verbindungen und ihrer Vorstufen, die Charakterisierung der Proben sowie in Kooperation physikalische Untersuchung der Grenzschichten. Zudem sollen Analogien mit anorganischen 2D-Schichtsystemen entsprechender Elementkombinationen untersucht werden, die in Kooperation mit der Arbeitsgruppe von David C. Johnson von der Universität von Oregon, USA, hergestellt werden.



Prof. Dr. Stefanie Dehnen
Philipps-Universität Marburg
Anorganische Chemie

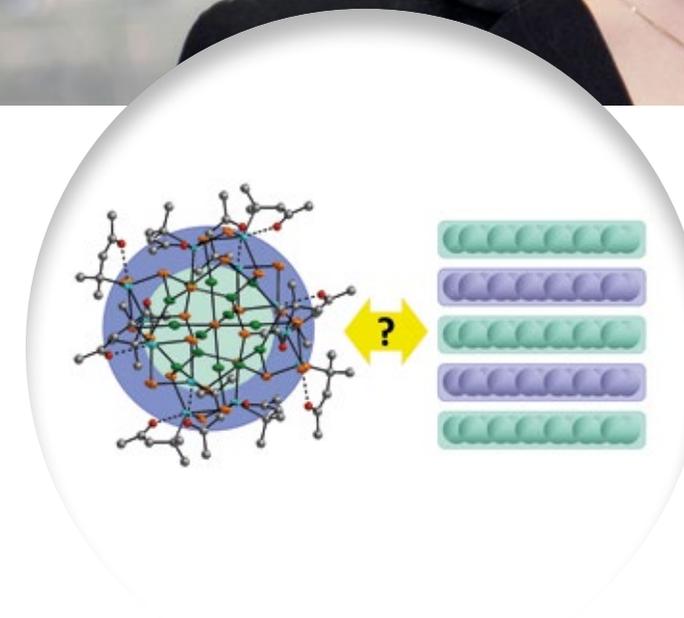
(+49) 6421 28-25751
dehnen@chemie.uni-marburg.de

EXPERTISE:

Anorganische Synthese, organometallische Synthese, Kristallstrukturanalyse, Spektroskopie (NMR/IR/Raman/UV-Vis), thermogravimetrische Analyse, Quantenchemie von Molekülen

Materialien: 2D Grenzflächen, Anorganik/Organik

Methoden: Chemische Synthese, Strukturanalyse

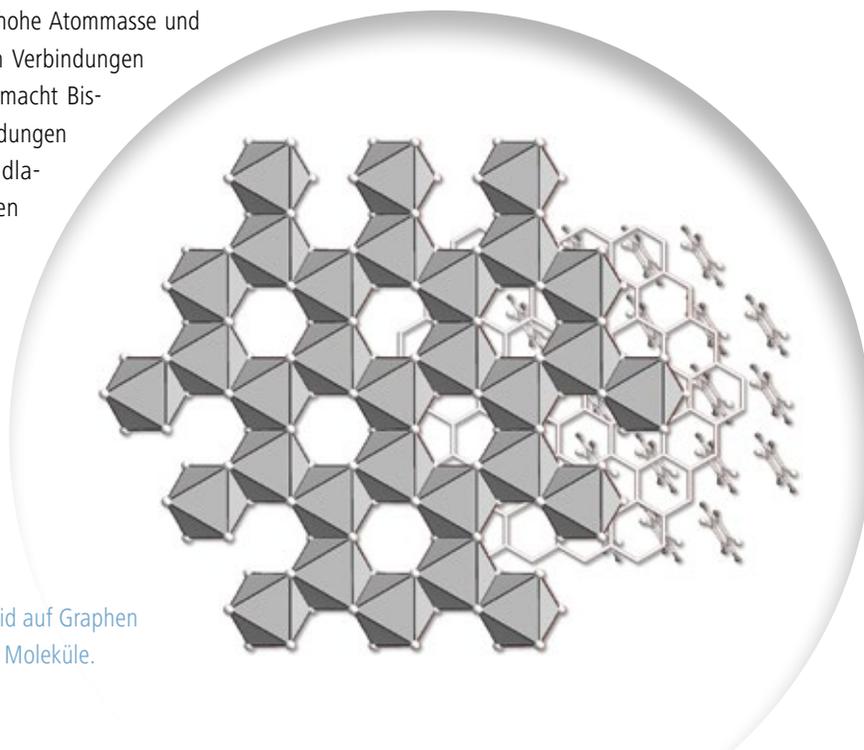


Multilayer-Cluster wie das links gezeigte Beispiel $[Ag_6(\mu_6-Se)(Ag_8Se_{12})\{(R_{Sn})_2Se_2\}_6]$ (R = organischer Ligand) bestehen aus schalenartig angeordneten Metallchalkogenid-Einheiten, die sich zum Beispiel von Ag_2Se und $SnSe_2$ ableiten lassen. Damit stellen sie sphärische Analoga von 2D-Schichten entsprechender Chalkogenide dar, wie sie rechts zu sehen sind - mit entsprechend veränderter elektronischer Struktur.

Bismut(III)-iodid als 2D-Material für Hybridverbindungen

Der Elementbaukasten der Chemie bietet vielfältige Möglichkeiten, Materialsysteme mit bestimmten Eigenschaften maßzuschneidern. So versprechen sich die Forscherinnen und Forscher im SFB von Bismut und seinen Verbindungen neue Erkenntnisse für die Präparation und das Verhalten von 2D-Schichtsystemen. Bismut gilt als Alternative zum Blei in sogenannten Perowskit-Solarzellen, denn es ist ungiftig. Ebenso hat es eine hohe Atommasse und zeigt dadurch auch in seinen Verbindungen ungewöhnliche Effekte. Das macht Bismutverbindungen für Anwendungen und die physikalische Grundlagenforschung gleichermaßen interessant. Die Forscherinnen und Forscher um Dr. Johanna Heine suchen daher nach Synthesewegen, um 2D-Monolagen aus BiI_3 herzustellen.

Schicht für Schicht: Bismutiodid auf Graphen und einer Schicht organischer Moleküle.



Im Grunde gibt es für 2D BiI_3 -Schichten zwei Syntheserouten, welche die Forscherinnen und Forscher systematisch untersuchen: die Exfoliation und die Interkalation. Bei der Exfoliation kommt als eine Variante die „Tesafile-Methode“ zum Einsatz. Von einem Kristall der Verbindung ziehen die Forscher mittels Klebestreifen einzelne Lagen ab.



Dr. Johanna Heine
Philipps-Universität Marburg
Anorganische Chemie
(+49) 6421 28-25527
johanna.heine@chemie.uni-marburg.de

EXPERTISE:

Anorganische Synthese und Charakterisierung, Chemie der Bismut-Verbindungen, Kristallstrukturanalyse, optische Spektroskopie

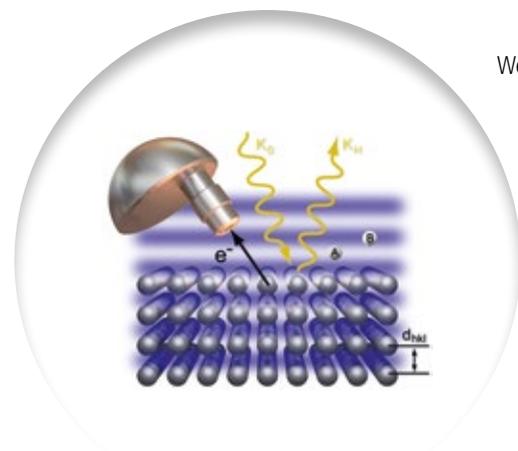
Materialien: Anorganik/Organik, 2D Grenzflächen

Methoden: Chemische Synthese

Alternativ gibt es hier noch das chemische Ablösen in organischen Lösungsmitteln und die Gasphasen-Abscheidung. „Bei der Interkalation wollen wir organische Moleküle zwischen die BiI_3 -Schichten des Kristalls zwingen“, sagt Dr. Johanna Heine. Für BiI_3 ist das noch nicht beschrieben, sollte aber gemäß Theorie möglich sein. Interessant ist auch, wie sich die eingeschobenen organischen Moleküle anordnen. Das wollen sie durch die Art der Moleküle auch steuern lernen.

Struktur und Phononen von hetero-epitaktischen Schichtsystemen aus schwach wechselwirkenden 2D-Materialien und molekularen Schichten

A 12



Prinzip der Methode der stehenden Röntgenwellenfelder (XSW): Die von einem stehenden Röntgenwellenfeld lokal ausgelösten Photoelektronen werden registriert, und aus deren Verteilung die vertikale Position der emittierenden Atome mit extrem hoher Genauigkeit ermittelt.

Wenn eine Monolage eines Materials – also ein 2D-Material – auf einem Substrat lagert, welche Wechselwirkungen bilden sich aus? Wie beeinflusst die Unterlage die Monolage bzw. kann dieser Einfluss gar reduziert werden, so dass man idealerweise nur die 2D-Eigenschaften vorfindet? Solche Fragen stellen sich die Forscher Stefan Tautz, François Bocquet und Christian Kumpf und ihre Kollegen vom Jülicher Peter-Grünberg-Institut. Die Idee, die Tautz mit Partnern im SFB weiterentwickelt, ist das Aufeinanderstapeln von Monolagen, also 2D-Materialien verschiedener Substanzen. „Die Eigenschaften sind dann komplett durch die Grenzflächeneffekte bestimmt“, sagt Stefan Tautz. „Die inneren Grenzflächen sind das Material“.

Dem wollen die Forscher mit drei verschiedenen Experimentiertechniken auf den Grund gehen. Mit der durchstimmbaren Synchrotronstrahlungsquelle Diamond in der Nähe von Oxford (GB) untersuchen sie die Abstände und Struktur der Monolagen und welche Rolle beispielsweise

die Temperatur dabei spielt. „Die Abstände sagen viel über die Wechselwirkungen zwischen den Schichten aus“, sagt Christian Kumpf. Etwa, wie sich die Wellenfunktionen zweier Schichten mischen und neue Grenzflächenzustände erzeugen. „Hier bringen wir viel Erfahrung in den SFB.“

François Bocquet untersucht die Monolagensysteme mit der Methode HREELS, einer besonderen Form der Elektronenstreuung, die Rückschlüsse auf kollektive Schwingungsphänomene (Phononen) im Material erlaubt. „Die Phononen bestimmen die elektrischen Eigenschaften mit“, sagt François Bocquet und fügt hinzu: „HREELS ist speziell, das machen nicht viele Arbeitsgruppen und die Technik wurde überdies in Jülich entwickelt“.

In einem dritten Experiment schließen die Jülicher ihr Equipment an eine in Marburg neu entwickelte Laserquelle an. Dadurch wollen sie zusammen mit den Wissenschaftlern um Ulrich Höfer und Robert Wallauer (B6) zeitaufgelöst ganze Molekülorbitale betrachten und die Elektronenverteilung dynamisch untersuchen. „Das ist weltweit einmalig und zeigt, dass die Ideen und Methoden aus Marburg und Jülich hier perfekt zusammenpassen“, erklärt Stefan Tautz.



Prof. Dr. F. Stefan Tautz
Peter Grünberg Institut, Forschungszentrum Jülich
Experimentelle Physik

(+49) 2461 61-4561
s.tautz@fz-juelich.de

EXPERTISE:

Quanten Nanowissenschaft, Quantum Materialien, Oberflächenphysik

Materialien: Metall/Organik, Organik/Organik, 2D Grenzflächen

Methoden: Strukturanalyse, Epitaktisches Wachstum



Dr. François C. Bocquet
Peter Grünberg Institut, Forschungszentrum Jülich
Experimentelle Physik

(+49) 2461 61-3987
f.bocquet@fz-juelich.de

EXPERTISE:

Oberflächenphysik

Materialien: 2D Grenzflächen

Methoden: Strukturanalyse, Epitaktisches Wachstum



Prof. Dr. Christian Kumpf
Peter Grünberg Institut, Forschungszentrum Jülich
Experimentelle Physik

(+49) 2461 61-1452
c.kumpf@fz-juelich.de

EXPERTISE:

Oberflächenphysik, Wechselwirkungsphänomen an Grenzflächen

Materialien: Metall/Organik, Organik/Organik, 2D Grenzflächen

Methoden: Strukturanalyse, Epitaktisches Wachstum

Theorie elektronischer Grenzflächen-Zustände in schwach gebundenen Heterostrukturen

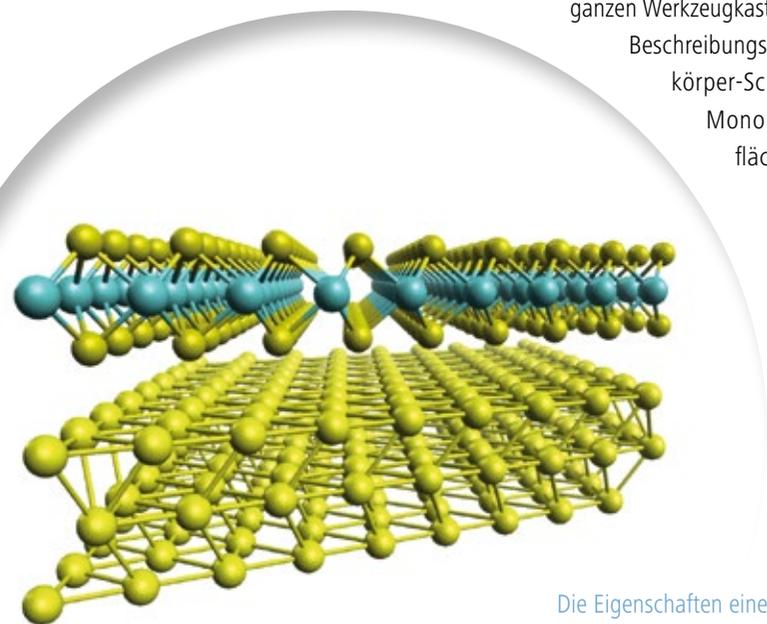
„Der SFB ist so weit fortgeschritten, dass ganz neue Dinge betrachtet werden können.“ So begründet der theoretische Physiker Michael Rohlfing vom Institut für Festkörpertheorie der Universität Münster seinen Einstieg in den SFB der

2. Förderphase. Der Theoretiker verfügt über einen ganzen Werkzeugkasten an Modellen und Beschreibungskonzepten für Festkörper-Schichtsysteme. „Die Monolagen und Grenzflächenphysik des SFB

passen da wie maßgeschneidert rein“, sagt Rohlfing, der in Münster ein 10-köpfiges Team leitet. Besonderes Augenmerk richtet das Team auf die Substanzklasse der „transition metal dichalcogenides“ (TMDC).

Zwei Aspekte stehen im Mittelpunkt des theoretischen Interesses: Wie hängen die Oberflächen- und Grenzflächeneigenschaften vom Substrat ab und lässt sich das entkoppeln? Wie können Moleküle, die auf die Oberfläche gebracht werden, die Materialeigenschaften modifizieren? „Durch diese Moleküle könnten wir die Monolage manipulieren und technisch nutzbar machen“, erklärt Rohlfing. Der Forscher und sein Team nutzen dazu Methoden der Dichtefunktionaltheorie sowie der um die Beschreibung elektronischer Anregungen erweiterten Vielteilchen-Störungstheorie.

„Damit können wir neben der Struktur beispielsweise die optischen Eigenschaften von Monolagen und Schichtsystemen beschreiben“, sagt der Forscher. Wichtiges Ziel seiner Arbeit sieht Michael Rohlfing auch darin, den Theorie-Werkzeugkasten weiter auszubauen, um die 2D-Materialien und -Schichtsysteme besser beschreiben und im iterativen Erkenntnisprozess mit den Experimentatoren verstehen zu können.



Die Eigenschaften eines atomar dünnen Halbleiters können durch ein darunter liegendes Trägermaterial entscheidend verändert werden.

Prof. Dr. Michael Rohlfing
Westfälische Wilhelms-Universität Münster
Festkörpertheorie

(+49) 251 83-33581
michael.rohlfing@wwu.de

EXPERTISE:

Vielteilchen-Quantenmechanik, optisch angeregte Zustände, Dichtefunktionaltheorie, Vielteilchen-Störungstheorie

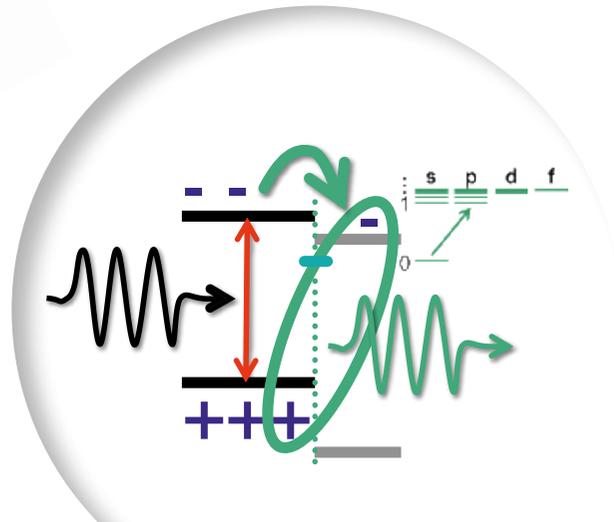
Materialien: Metall/Organik, 2D Grenzflächen

Methoden: Theorie/Modellierung



Ultrakurzzeitspektroskopie und Kontrolle von Anregungen an inneren Grenzflächen

Mittels der zeitaufgelösten, optischen Spektroskopie untersucht die Arbeitsgruppe von Sangam Chatterjee, wie sich elektronische Anregungen an Grenzflächen verhalten. Bringt man zwei Festkörper zusammen, entstehen mit den strukturellen Grenzflächen auch neue grenzflächen-spezifische elektronische Zustände, die etwa den Ladungsträgertransfer von einer Schicht in die andere, seine Effizienz und zeitliche Dynamik beeinflussen. Mit zeitaufgelöster Photolumineszenz- und Anrege-Abfrage-Spektroskopie wollen die Forscher nachvollziehen, welche Wege Anregungen wie Elektronen in der Energielandschaft der Grenzfläche nehmen.



Typische Modellsysteme sind beispielsweise Schichten aus Pentacen und Fulleren (hergestellt im Projekt A2 Witte) oder Cluster (aus dem Projekt A9 Dehnen). Die Forscher regen mit Lasern selektiv beispielsweise Elektronen in der Grenzschicht an. „So können wir die Dynamik im Material kontrollieren und wissen, wo Elektronen herkommen und wo sie hingehen“, sagt Sangam Chatterjee, der 2016 eine Heisenbergprofessur an der Justus-Liebig-Universität Gießen angetreten hat und dort weiter am SFB beteiligt ist. Die Forscher betrachten dabei neben der Anregung der Elektronen auch Prozesse wie die Bildung, die Relaxation und die Rekombination von Ladungstransferzuständen und gebundenen Elektron-Loch-Paaren (Exzitonen) an inneren Grenzflächen.

Sie wollen die Anzahl der untersuchten Materialsysteme weiter steigern, um das Erzeugen von Exzitonen und die Trennung (was einmal die Effizienz einer organischen Solarzelle bestimmen wird) immer besser zu verstehen.

Die Relaxationsdynamik an inneren Grenzflächen wird durch grenzflächenspezifische Anregungen wie Ladungstransferzustände grundlegend verändert.



Prof. Dr. Sangam Chatterjee
Justus-Liebig-Universität Gießen
Spektroskopie • Optik

(+49) 641 99-33100

sangam.chatterjee@physik.uni-giessen.de

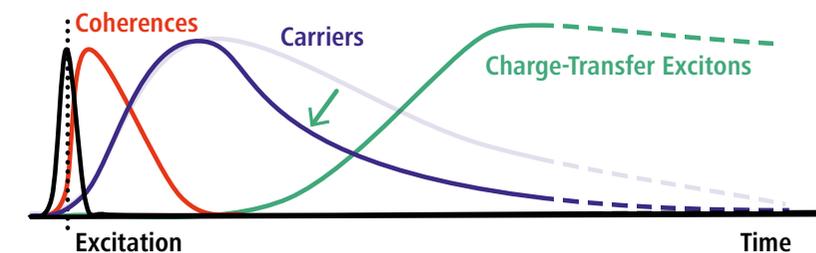
EXPERTISE:

Experimentalphysik, Festkörperphysik, Halbleiter-Optoelektronik, Ultrakurzzeitspektroskopie, Optik

Materialien: Metall/Organik, Anorganik/Anorganik, Organik/Organik

Methoden: Optische Spektroskopie

Ein weiterer Aspekt ist, welche Rolle die Morphologie bzw. die „Qualität“ einer Schicht, etwa bezogen auf die Rauigkeit und auf den Ladungsträgertransfer spielt. Ein wichtiges Ziel ist auch, das bisher am besten untersuchte und verstandene Halbleitermaterial, Silizium, als Schichtsubstrat in die Untersuchungen einzubeziehen, genauso wie weitere zukunftsweisende anorganische Werkstoffe wie 2D-Materialien oder Perovskite.



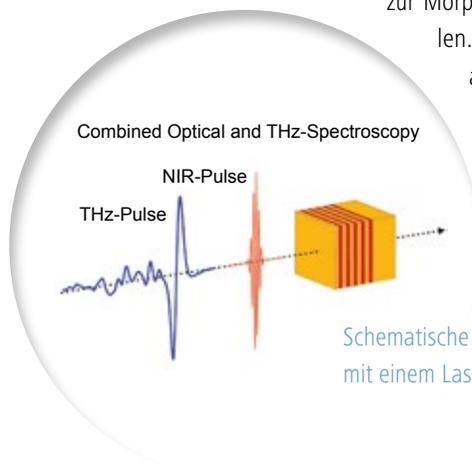
Zeitaufgelöste Terahertz- und optische Spektroskopie an vergrabenen Grenzflächen



Die Herausforderung der optischen Spektroskopie an inneren Grenzflächen liegt im schwachen Signal der Grenzflächenzustände gegenüber dem Volumenmaterial. Die Arbeitsgruppen von Martin Koch und Wolfram Heimbrodt nutzen daher eine Vielzahl unterschiedlicher Methoden, wie die zeitaufgelöste Photolumineszenz, Pump-Probe-Techniken, die Modulationsspektroskopie, Vierwellenmischen und Photoreflexionsspektroskopie um sich diese schwache opto-elektronische Signatur der Grenzfläche zu erschließen. Die verschiedenen Methoden ermöglichen auch einen Einblick in die Ladungsträgerdynamik auf sehr unterschiedlichen Zeitskalen. Da diese Dynamik stark von der Beschaffenheit der Grenzfläche abhängt, lässt sich hierdurch direkt ein Zusammenhang zur Morphologie des jeweiligen Schichtsystems herstellen. „Mit den genutzten Messverfahren sind wir auf wenige Atomlagen empfindlich und können sowohl die elektronische Anregung als auch die Antwort des Systems studieren“, sagt Wolfram Heimbrodt.

Im Fokus steht für die Forscherinnen und Forscher die Bildungsdynamik von Grenzflächen-Exzitonen in Halbleiter-Heterostrukturen. Dazu erzeugen die Experimentatoren zunächst ein Elektron-Loch-Paar in einer Schicht mit einem Laserimpuls im sichtbaren oder nah-infraroten Spektralbereich. Die Elektronen wandern schnell in eine benachbarte Schicht, in der sie einen günstigeren Energiezustand einnehmen und überwinden dabei eine Grenzfläche. Schließlich entstehen Charge-Transfer-Exzitonen, d.h. Elektronen und Löcher. Elektron und Loch befinden sich auf verschiedenen Seiten der Grenzfläche. Solche Charge-Transfer-Exzitonen sind der erste Schritt, um etwa in einer Solarzelle die von Sonnenstrahlen erzeugten Ladungsträgerpaare (Elektronen und Löcher) zu separieren und in Strom zu verwandeln. „Wir interessieren uns dafür, wie schnell die Ladungsträger durch die Grenzfläche treten und wie schnell sich die Charge-Transfer-Exzitonen bilden“, sagt Martin Koch.

Zusätzlich zu den breit aufgestellten optischen Untersuchungsmethoden steht ein leistungsfähiger Aufbau zur Erzeugung von elektromagnetischen Impulsen im Terahertz-Frequenzbereich zur Verfügung, mit dem sich weitere, optisch unzugängliche Anregungen durchführen lassen und mit dem die Zustände gezielt manipuliert werden können.



Schematische Darstellung eines Anrege-Abfrage-Experiments mit einem Laserpuls und einem Terahertz-Puls.

Prof. Dr. Martin Koch
Philipps-Universität Marburg
Experimentelle Halbleiterphysik

(+49) 6421 28-22119
martin.koch@physik.uni-marburg.de

EXPERTISE:

Laserspektroskopie von Halbleitern und Halbleiter-Heterostrukturen, Terahertz-Spektroskopie

Materialien: Anorganik/Anorganik

Methoden: Optische Spektroskopie



Die Arbeitsgruppen arbeiten dabei eng mit A1 (Stolz) und A5 (Volz) zusammen, welche die Halbleiterschichten herstellen und charakterisieren, sowie mit der Arbeitsgruppe Theoretische Halbleiterphysik B4 (SW Koch), welche mit Modellrechnungen zum Verständnis der Experimente beiträgt.

Prof. Dr. Wolfram Heimbrodt
Philipps-Universität Marburg
Experimentelle Halbleiterphysik

(+49) 6421 28-21353
wolfram.heimbrodt@physik.uni-marburg.de

EXPERTISE:

Optische und magneto-optische Spektroskopie von Halbleiternanostrukturen, Exzitonendynamik in Halbleiternanostrukturen und organisch-anorganischen Hybriden

Materialien: Anorganik/Anorganik

Methoden: Optische Spektroskopie

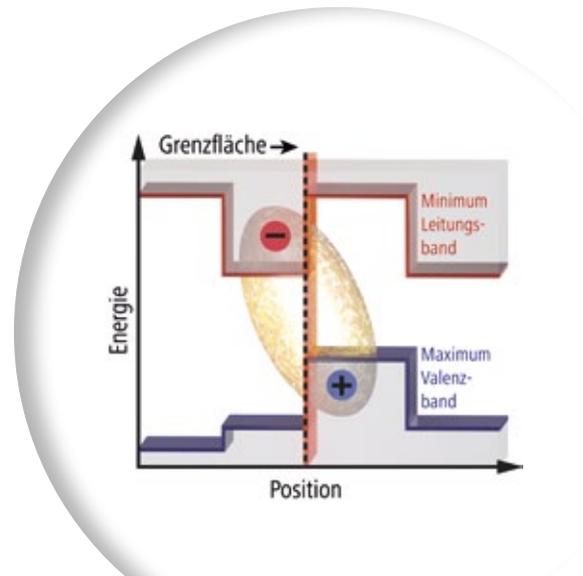


Mikroskopische Theorie der optischen Anregungen in grenzflächendominierten Materialsystemen

Theoretischer Physiker und Leibnizpreisträger Stephan Koch bezeichnet das Verständnis des Charge-Transfer-Exzitons als den „heiligen Gral“ in der Grenzflächenphysik. Generell entsteht ein Exziton durch die Anregung eines Elektrons ins Leitungsband, wodurch ein Loch im Valenzband eines Halbleitersystems entsteht. Ein Charge-Transfer-Exziton bildet sich, sobald entweder das Elektron oder das Loch durch die Grenzschicht in das benachbarte Material gelangt und hier einen energetisch günstigeren Zustand annimmt. Für eine Reihe elektronischer Bauteile ist das Verhalten dieser Art räumlich getrennter Exzitonen von großer Wichtigkeit.

Da es das Charge-Transfer-Exziton speziell an den inneren Grenzflächen mehrkomponentiger Materialstrukturen gibt, „spiegeln sich die Eigenschaften der Grenzfläche im Verhalten des Exzitons wider“, sagt Stephan Koch. Die Theoretiker des Arbeitsbereichs B4 untersuchen daher die Mechanismen, mit denen Exzitonen erzeugt und wieder vernichtet werden. Zentrale Fragestellungen sind: Welche Eigenschaften sind messbar und welche Rückschlüsse lassen sich von den theoretischen Modellen und experimentellen Befunden auf die Grenzfläche ziehen?

„Neben den Grenzflächen in III-V Halbleitersystemen interessieren uns ganz besonders auch Heterostrukturen aus quasi-zweidimensionalen Übergangsmetall-Dichalkogeniden“, sagt Stephan Koch. „Wir pflegen nach wie vor eine intensive Zusammenarbeit mit Prof. Mackillo Kira, der im vergangenen Jahr einen sehr ehrenvollen Ruf an die Universität in Ann Arbor, Michigan/USA angenommen hat.“ Gemeinsam versuchen die Theoretiker nicht nur detaillierte mikroskopische Modelle zu entwickeln, sondern auch quantitative Vorhersagen zu machen, die in Experimenten überprüft werden können.



Prof. Dr. Stephan W. Koch
Philipps-Universität Marburg
Theoretische Halbleiterphysik

(+49) 6421 28-21336

stephan.w.koch@physik.uni-marburg.de

EXPERTISE:

Festkörpertheorie, optische und elektronische Eigenschaften von Festkörpern, Vielteilcheneffekte, Halbleiter Quantenoptik, Quanten-Confinement-Effekte, kohärente und ultraschnelle Phänomene, Halbleiterlasertheorie, Mikroresonatoren und photonische Kristalle

Materialien: Anorganik/Anorganik, 2D Grenzflächen

Methoden: Theorie/Modellierung

Schematische Darstellung eines Charge-Transfer-Exzitons an der Grenzfläche zwischen anorganischen Materialien mit Typ-II Struktur.

Zeitaufgelöste nichtlineare optische Spektroskopie an Halbleitergrenzflächen

Die Methode der Frequenzverdopplung von Laserimpulsen in Festkörpern ist nur eines der optischen Verfahren, mit denen das Team um Ulrich Höfer und Gerson Mette die Grenzflächen von Halbleitern untersucht. Die Physikerinnen und Physiker wollen damit die elektronische Struktur und die Dynamik des Ladungsträgertransfers zwischen Halbleiterschichten erforschen. Ein Modellsystem ist Galliumphosphid (GaP) auf Silizium (Si). GaP ist für den Laserimpuls zwar durchsichtig, in der Grenzfläche bewirken nichtlineare Effekte aber eine Verdopplung der Frequenz und der Strahl wird auf charakteristische Weise reflektiert. Durch zeitaufgelöste Messungen können die Forscher dynamische Effekte, wie den Aufbau extrem kurzzeitiger elektrischer Felder, untersuchen. Im Materialsystem GaP/Si stieß man dabei auf ganz neue elektronische Zustände in der Grenzfläche. Das war überraschend, da dieses Materialsystem schon häufig im Blick von Experimentatoren und Theoretikern lag.

Nun wollen die Forscherinnen und Forscher die Methodik auf neuartige zweidimensionale Materialien insbesondere des Typs Übergangsmetall-Dichalcogenid („transition metal dichalcogenide“, TMDC) übertragen. Die TMDC-Schichten wie MoS₂ oder WS₂ sind dabei nur eine Monolage dick. „Wir erwarten hier, eine ganz neue Physik zu entdecken“, verspricht sich Gerson Mette.

MoS₂ ist als Volumenmaterial beispielsweise ein indirekter Halbleiter, in der Monolage aber ein direkter Halbleiter. Die Monolage Graphen dagegen ist metallisch, hexagonales Bornitrid (h-BN) wiederum ein Isolator. „Für die Grundlagenforschung sind solche Materialsysteme und insbesondere deren Kombination höchst interessant“, kommentiert Mette. Die Forscher erhalten die Schichtsysteme von verschiedenen Kooperationspartnern und vermessen diese mit ihren Lasermethoden. Durch geschicktes Anregen und Drehen der Probe unter dem Laserstrahl können sie die Struktur dieser Sandwichmaterialien untersuchen und die Dynamik des Ladungstransfers entschlüsseln.

Mit der Methode der kohärenten Phononenspektroskopie sind die Projektpartner Kunie Ishioka vom NIMS in Japan und Hrvoje Petek von der University of Pittsburgh, PA/USA, gleichfalls neuen Phänomenen auf der Spur. Durch eine spezifische Anregung in der Grenzfläche entstehen extrem kurze akustische Schwingungen, die sich wellenförmig ausbreiten. „Ähnlich wie Geophysiker mit seismischen Wellen das Erdinnere untersuchen, können wir mit der Phononenspektroskopie den Festkörper mit seinen Grenzflächen erkunden“, stellt Ulrich Höfer fest.

Prof. Dr. Ulrich Höfer Philipps-Universität Marburg – Oberflächenphysik

(+49) 6421 28-24215

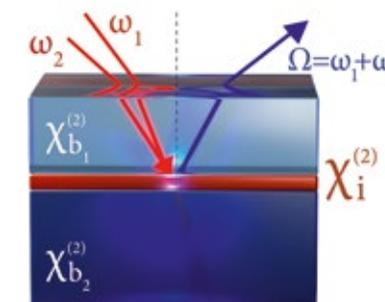
ulrich.hoefer@physik.uni-marburg.de

EXPERTISE:

Experimentalphysik, Laserspektroskopie an Oberflächen und Grenzflächen, ultraschnelle Elektronendynamik, Adsorption auf Halbleiteroberflächen

Materialien: Anorganik/Anorganik, Anorganik/Organik, 2D Grenzflächen

Methoden: Optische Spektroskopie



Schematische Darstellung der optischen Frequenzverdopplung (engl. „second-harmonic generation“, SHG) an einer inneren Halbleitergrenzfläche.

Dr. Gerson Mette Philipps-Universität Marburg – Oberflächenphysik

(+49) 6421 28-24123

gerson.mette@physik.uni-marburg.de

EXPERTISE:

Experimentalphysik, Nichtlineare optische Spektroskopie an Grenzflächen, Rastertunnelmikroskopie, Adsorption auf Halbleiteroberflächen

Materialien: Anorganik/Anorganik, Anorganik/Organik, 2D Grenzflächen

Methoden: Optische Spektroskopie

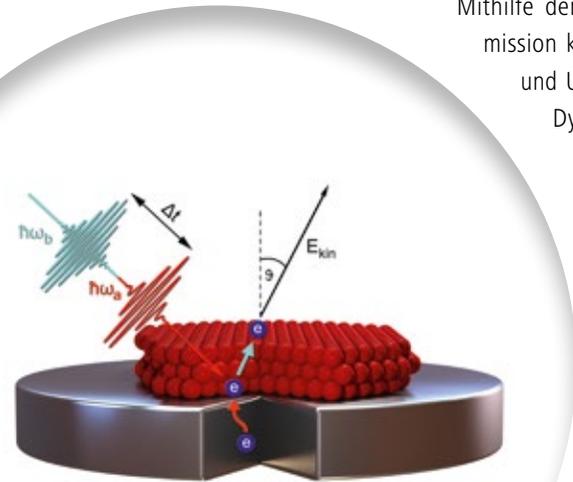


Untersuchungen der Elektronen- und Exzitonendynamik an Grenzflächen mit Hilfe der zeitaufgelösten Zweiphotonenphotoemission

Mithilfe der zeitaufgelösten Zweiphotonen-Photoemission können die Forscher um Robert Wallauer und Ulrich Höfer die elektronische Struktur und Dynamik von oberflächennahen Grenzflächen bis hin zu mikroskopischen Größenskalen komplett entschlüsseln. Wie schnell, mit welchem Impuls bewegen sich die elektrischen Ladungen, welche Energie besitzen die angeregten Zustände und wie verändern sie sich auf kurzen Zeitskalen? Mit einem Anregungsimpuls treiben sie zunächst ein Elektron aus dem Grundzustand in einen angeregten Zustand („Pump“); es bleibt im Material gebunden. Ein zweiter Laserimpuls („Probe“) schlägt das Elektron ins Vakuum.

Im Analysator detektiert die Arbeitsgruppe Energie und Richtung des Elektrons. Durch den systematischen zeitlichen Versatz von „Pump“ und „Probe“ und der Variation der Laserenergie können die Forscher anhand der Änderung der ausgesendeten Elektronenimpulse auf das Verhalten der Zustände im Materialsystem schließen. Die exakte Dynamik des Elektrons nach der Anregung kann im Detail nachvollzogen werden.

Im Fokus stehen dabei sowohl Grenzflächenzustände an metall-organischen Grenzflächen, die beispielsweise für neuartige elektrische Kontakte in der organischen Elektronik zunehmend an Bedeutung gewinnen werden, als auch die Exzitonendynamik in 2D Materialien wie MoS₂ oder WS₂, die zur Materialklasse der TMDs („Transition Metal Dichalcogenide“) gehören. Neben herkömmlichen Femtosekunden-Impulslasern haben die Forscher dazu eine spezielle selbst entwickelte Laserquelle zur Hand. Ein komplexer Aufbau erzeugt aus einem Ausgangslaser mit 800 Nanometern Wellenlänge einen Laserstrahl im UV-Bereich von rund 50 Nanometern. „Das neue Lasersystem ist toll. Damit lassen sich im eigenen Labor in Marburg Messungen durchführen, die sonst nur nach monatelanger Vorlaufzeit an Großforschungseinrichtungen möglich wären“, sagt Robert Wallauer. Erzeugt wird der UV-Impuls, indem die Laserimpulse sehr stark in einen Argon-Gasstrahl fokussiert werden. Bei der Wechselwirkung des Lasers mit Argon entstehen höhere Harmonische seiner Ausgangsfrequenz, welche dann im ultravioletten Bereich liegen. Eine Spezialität der (Marburger) Lichtquelle ist die hohe Wiederholungsrate der Impulse von über 100 kHz, mit der die Forscher auch kleinste Signale sichtbar machen können.



Schematische Darstellung der Zweiphotonenphotoemission (2PPE) an einer Metallgrenzfläche. Elektronen werden nur emittiert, nachdem sie sowohl ein Photon des „Pump“-Strahls ($h\omega_p$) und ein Photon des „Probe“-Strahls ($h\omega_s$) absorbiert haben.



Prof. Dr. Ulrich Höfer
Philipps-Universität Marburg
Oberflächenphysik

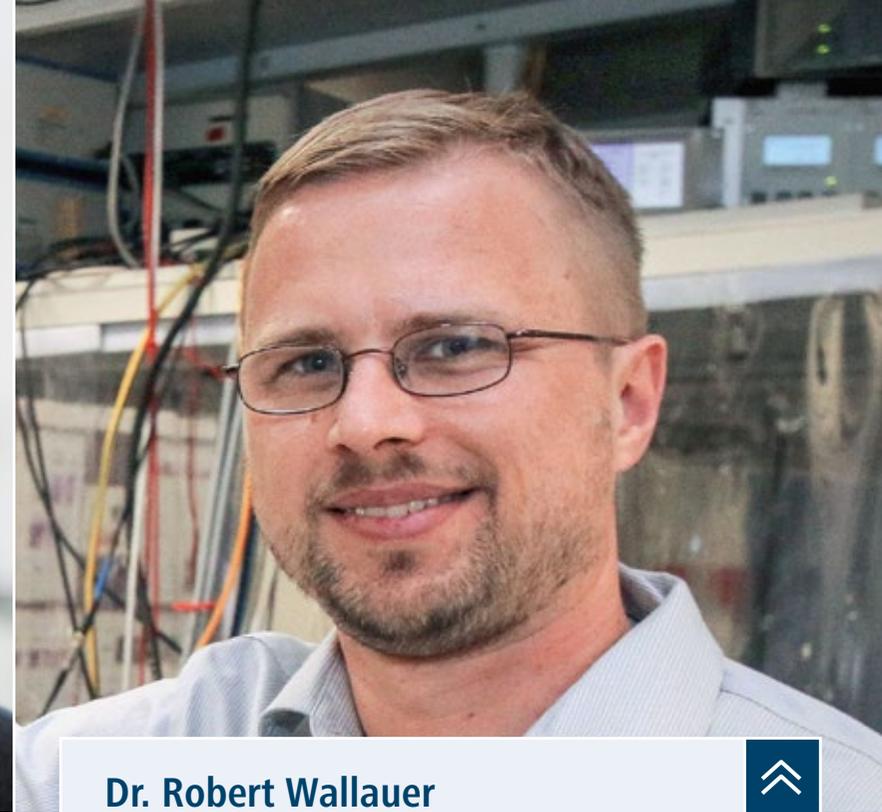
(+49) 6421 28-24215
ulrich.hoefer@physik.uni-marburg.de

EXPERTISE:

Experimentalphysik, Laserspektroskopie an Oberflächen und Grenzflächen, ultraschnelle Elektronendynamik, Adsorption auf Halbleiteroberflächen

Materialien: Metall/Organik, Anorganik/Organik, Organik/Organik, 2D Grenzflächen

Methoden: Epitaktisches Wachstum, Optische Spektroskopie



Dr. Robert Wallauer
Philipps-Universität Marburg
Oberflächenphysik

(+49) 6421 28-21406
robert.wallauer@physik.uni-marburg.de

EXPERTISE:

Experimentalphysik, hochauflösende Elektronenspektroskopie, Laserspektroskopie an Oberflächen und Grenzflächen, ultraschnelle Elektronendynamik

Materialien: Metall/Organik, Anorganik/Organik, 2D Grenzflächen

Methoden: Epitaktisches Wachstum, Optische Spektroskopie

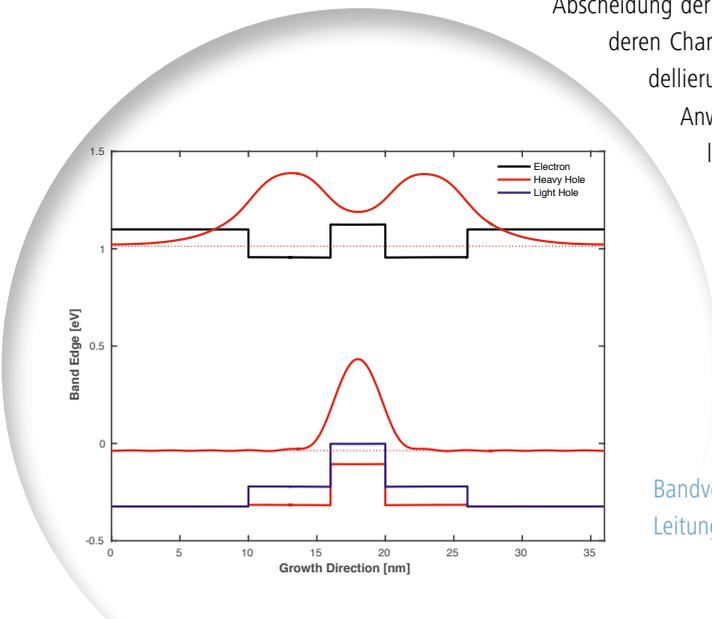
Grenzflächendominierte Halbleiter-Laserstrukturen

Ein wichtiges Anwendungsprojekt im SFB ist der Aufbau, die optische Vermessung und die Theorieentwicklung sogenannter W-Laser. Das „W“ leitet sich von einer W-förmigen Bandstruktur bestimmter Halbleiterschichtfolgen ab. Das Verständnis der Grenzflächeneigenschaften dieser Schichtfolgen ist hier zentral für die Laserfunktion. Damit lassen sich die Laserparameter genau kontrollieren.

Im Fokus der Arbeitsgruppen von Wolfgang Stolz (Experiment) und Stephan Koch (Theorie) liegen die epitaktische Abscheidung der laseraktiven Schichtsysteme, deren Charakterisierung sowie der Modellierung und Optimierung für die Anwendung. Ziel sind bei Wellenlängen von 1,3 bis 1,55 Mikrometer betriebene Laser mit Ausgangsleistungen von einigen Watt.

Da sich Schichtdicken und Materialeigenschaften gut variieren lassen, haben die Forscher auch Laser mit über 2 Mikrometern Wellenlänge im Visier. „Diese W-Strukturen sind für die Theorie faszinierend: Viele ihrer optischen Eigenschaften lassen sich systematisch berechnen“, sagt Stephan Koch. Mit Methoden der quantenmechanischen Vielteilchenphysik können die Forscher das Verhalten der Elektronen, den Ladungstransfer über die Grenzflächen, sowie die Elektronenverteilung berechnen und auf anwendungsspezifische Eigenschaften wie Laserverstärkung und Verluste abstimmen.

„Damit lässt sich das Bauteil optimieren, bevor wir es herstellen“, sagt Wolfgang Stolz. Mit dem Verfahren der MOVPE („metal organic vapor phase epitaxy“) lässt die Arbeitsgruppe von Wolfgang Stolz die Teststrukturen nach der Rezeptur der Theoretiker aufwachsen. Spektroskopisch prüfen sie die Modellsysteme, wobei auch Überraschungen auftreten. Eine gewisse Rauigkeit in den Grenzflächen erhöht die Effizienz des Lasers. Physikalisch ist dieser „Dreckeffekt“ an einem idealen Modellsystem plausibel: Die Wellenfunktionen der Ladungsträger weiten sich auf und überlappen stärker, was die Laser-Übergänge verstärkt.



Bandverläufe im Leitungs- und Valenzband



Prof. Dr. Wolfgang Stolz
Philipps-Universität Marburg
Struktur- & Technologieforschungslabor

(+49) 6421 28-25696
wolfgang.stolz@physik.uni-marburg.de

EXPERTISE:

Epitaktisches Wachstum von III/V Halbleiter Hetero- und Nanostrukturen, deren strukturelle, elektrische und optoelektronische Charakterisierung, Halbleitertechnologie, optoelektronische Anwendungen

Materialien: Anorganik/Anorganik

Methoden: Epitaktisches Wachstum, Optische Spektroskopie, Strukturanalyse



Prof. Dr. Stephan W. Koch
Philipps-Universität Marburg
Theoretische Halbleiterphysik

(+49) 6421 28-21336
stephan.w.koch@physik.uni-marburg.de

EXPERTISE:

Festkörpertheorie, optische und elektronische Eigenschaften von Festkörpern, Vielteilcheneffekte, Halbleiter Quantenoptik, Quanten-Confinement-Effekte, kohärente und ultraschnelle Phänomene, Halbleiterlasertheorie, Mikroresonatoren und photonische Kristalle

Materialien: Anorganik/Anorganik

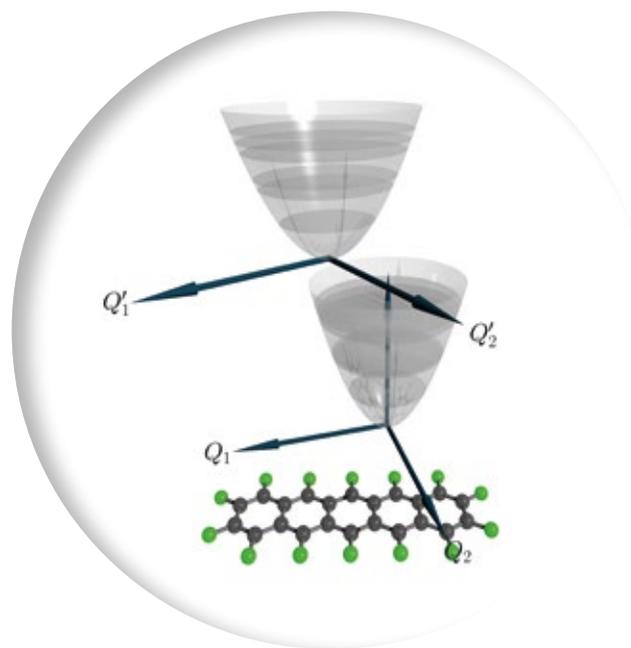
Methoden: Theorie/Modellierung

Quantenchemie für molekulare Schwingungs- und elektronische Übergänge an organischen Grenzflächen

Organische Solarzellen und verwandte Systeme sind bisher bei weitem nicht so effizient wie sie sein könnten. Das liegt unter anderem daran, dass ein umfängliches Verständnis der elektronischen Prozesse an den Grenzflächen noch fehlt. Die Arbeitsgruppe von Robert Berger gewinnt von theoretischer Seite grundlegende Einblicke, unterbreitet Vorschläge an die Experimentatoren organischer Grenzflächensysteme und verfeinert die Theoriebildung bei der Interpretation der Experimente. Im Blick stehen die Dynamik von Einzel- und Multi-Exzitonen, der Elektronentransfer an der Grenzfläche, die begleitende Schwingungsdynamik der Moleküle sowie die zugehörigen Korrelationsphänomene.

An Molekülen wie Pentacenderivaten, Perylenen, Pyrazinen und Fullerenen entwickelt das Team von Robert Berger theoretische Beschreibungsmodelle. „Ausgedehnte π -Systeme bieten spannende Herausforderungen“, sagt Robert Berger. Die Chemiker vergleichen daher verschiedene theoretische Zugänge, um die Komplexität der Systeme in den Griff zu bekommen. Im Blick hat Berger insbesondere die Bildung und den Zerfall von Bi-Exzitonen. „Hier suchen wir mit theoretischen Methoden nach Molekülen, die diese Vorgänge ausschließlich an Grenzflächen zeigen“, sagt der

Theoretiker. Dadurch hängt die Bildung der Bi-Exzitonen sensitiv von der Struktur der Grenzfläche ab. Sie können als Sonde für Korrelationsphänomene innerer Grenzflächen dienen und die Ladungsträgerbildung und den Transport entscheidend beeinflussen.



Prof. Dr. Robert Berger Philipps-Universität Marburg Theoretische Chemie

(+49) 6421 28-25687
robert.berger@chemie.uni-marburg.de

EXPERTISE:

Quantenchemie, Theoretische Chemie, Methodenentwicklung (vibronische Strukturmethoden, molekulare Eigenschaften, elektroschwache Quantenchemie, relativistische Quantenchemie), Anwendungen (Photochemie, Photophysik, theoretische Spektroskopie, Materialien, Katalyse)

Materialien: Organik/Organik, Anorganik/Organik

Methoden: Theorie/Modellierung

Die Abbildung illustriert eine der Herausforderungen in der Beschreibung vibronischer Strukturen, den Duschinsky-Effekt. Dieser beschreibt verschobene, verformte und gegeneinander rotierte Potentialhyperflächen verschiedener elektronischer Zustände und Ladungszustände.



Wir gehen an die Grenze

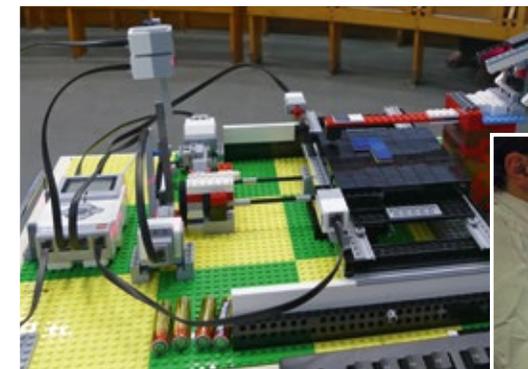
Das Chemikum Marburg ist ein erfolgreiches Science Center und Mitmach-Labor mitten in der Universitätsstadt Marburg. Rund 13.000 Besucher kommen jährlich zu den Vorträgen, Führungen und Workshops.

Unter dem Motto „Wir gehen an die Grenze“ präsentiert sich dort nun auch der Sonderforschungsbereich 1083 mit rund einem Dutzend Exponaten und Experimenten.



Insgesamt deckt das Chemikum mit 50 Experimentierstationen ganz verschiedene Aspekte der Naturwissenschaften im Leben der Menschen ab. Verteilt über das gesamte Chemikum kommen die Besucher immer wieder mit Grenzflächen-Experimenten und Exponaten des SFB in Berührung. Dazu zählen Licht- und Wellenphänomene. Mit einem AFM („atomic force microscope“) aus Lego-Bausteinen können kleinste Strukturen untersucht werden. Dann geht es um Grenzflächentechnik für Smartphones, günstige Oberflächeneigenschaften fürs Kleben von Bauteilen oder chemische Reaktionen an Oberflächen wie bei der Nylon-Herstellung.

Die Experimente im Chemikum sind wesentlich Betreuungsaufwändiger als in klassischen Science Centern, berichtet Museumsleiter Christof Wegscheid-Gerlach. Die Besucher bekommen Studierende oder Doktoranden als Betreuer zur Seite gestellt. „Wir lassen nicht Knöpfchen drücken. Die Besucher können die Versuche selbst durchführen“, sagt Wegscheid-Gerlach. Günstig gelegen am Hauptbahnhof von Marburg hat das Chemikum einen Einzugsbereich von Frankfurt bis Kassel, entlang der Bahnlinie, aber auch darüber hinaus.



Gleichzeitig präsentiert sich das Chemikum „mobil“ auf Stadt- und Strassenfesten. Der SFB-Grenzflächenversuch zu Solarzellen bietet sich hierfür besonders an.

Die Integration des SFB in das Chemikum hat für die Museumsdirektorin Prof. Dr. Stefanie Dehnen gleich zwei wichtige Aspekte: „Unser Chemikum bekommt neue, einzigartige Experimente. Das stärkt unser Alleinstellungsmerkmal unter den Science Centern.“ Ferner hat sich das Chemikum bewährt, naturwissenschaftliche Inhalte in die Öffentlichkeit zu tragen. „So können wir den SFB weiter bekannt machen“, sagt die anorganische Chemikerin Dehnen, die im SFB im Teilprojekt A9 forscht.

Das Chemikum ist immer in Bewegung und wird nie langweilig. Dadurch gelingt es der Einrichtung, Menschen auch mehrmals ins Museum zu locken. Seit Herbst 2017 gibt es Workshops, die sich speziell den Grenzflächenphänomenen widmen und sich insbesondere an Schulklassen richten.



Chemikum Marburg e.V.

Bahnhofstraße 7
35037 Marburg
Telefonische Buchungen/Anfragen:
06421-28 25 25 2

Mo-Fr.: 8.30-13.00 Uhr
Mi und Fr: 15.00-17.00 Uhr
Sa: 11.00-13.00 und 15.00-17.00 Uhr

Im Internet: www.chemikum-marburg.de

Internationale Partner

Rund um den Globus ist der SFB durch internationale Kooperationen vertreten. Die ohnehin guten Vernetzungen der ersten Förderperiode konnten nochmals erweitert werden, wobei Mackillo Kira – heute an der University of Michigan in Ann Arbor – als ehemaliger Gruppenleiter im Teilprojekt B4 auch für die Kontinuität steht. Auch innerhalb Deutschlands ist der SFB 1083 mit den neuen Standorten Gießen, Jülich und Münster nun deutlich breiter aufgestellt.



Prof. Dr. David Johnson
Center for Sustainable Materials Chemistry
University of Oregon, Corvallis, OR/USA



Prof. Dr. Mackillo Kira
Department of Electrical Engineering
University of Michigan, Ann Arbor, MI/USA



Prof. James Hone
Columbia Engineering
Columbia University, New York, NY/USA

Prof. Dr. Hrvoje Petek
Department of Physics and Astronomy
University of Pittsburgh, PA/USA



Prof. Dr. Christopher Stanton
Department of Physics
University of Florida, Gainesville, FL/USA



Prof. Dr. Pedro M. Echenique
Donostia International Physics Center (DIPC)
San Sebastián, Spain



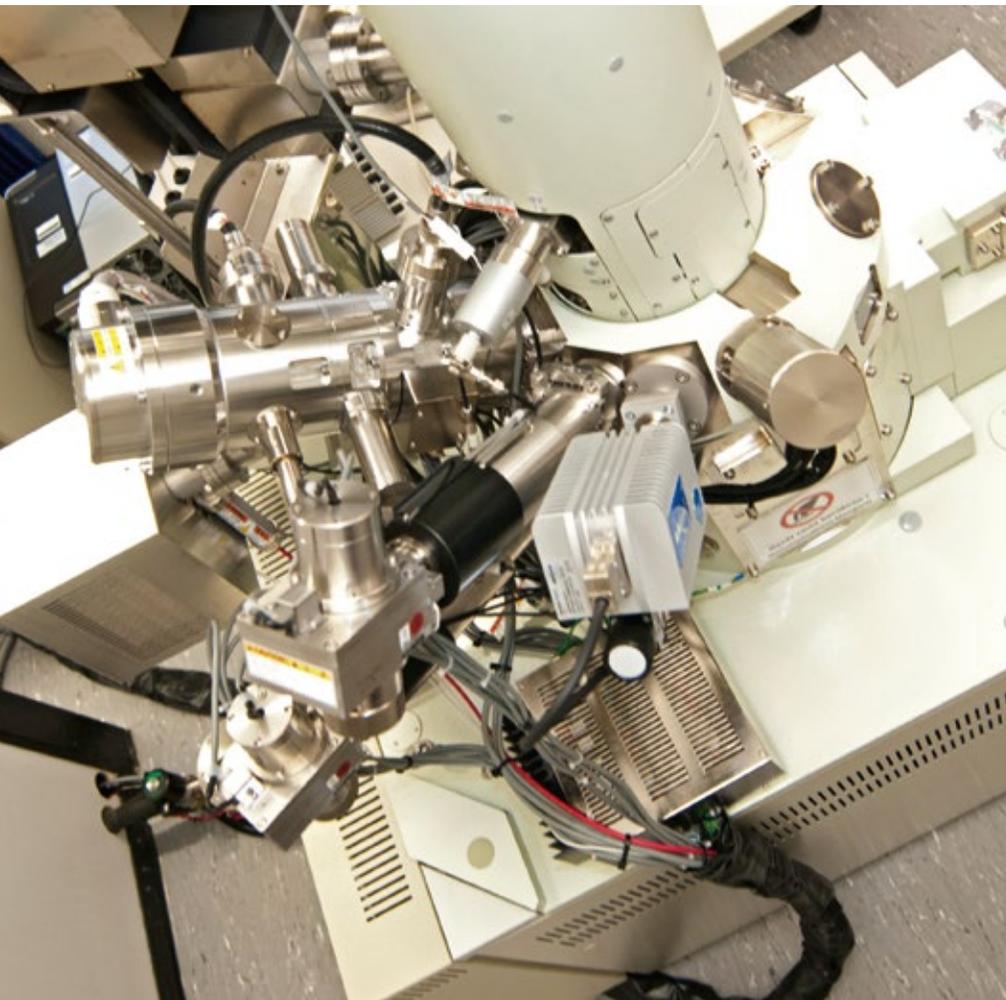
Dr. Daniel Sánchez-Portal
Centro de Física de Materiales, CSIC-UPV/EHU und DIPC
San Sebastián, Spain



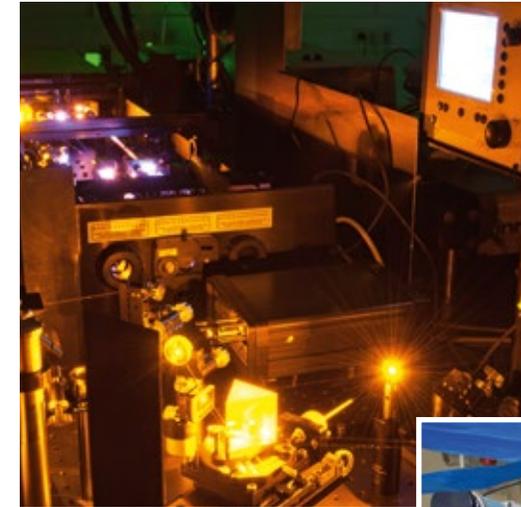
Dr. Kunie Ishioka
National Institute for Materials Science (NIMS)
Tsukuba, Japan

Infrastruktur – eine Übersicht

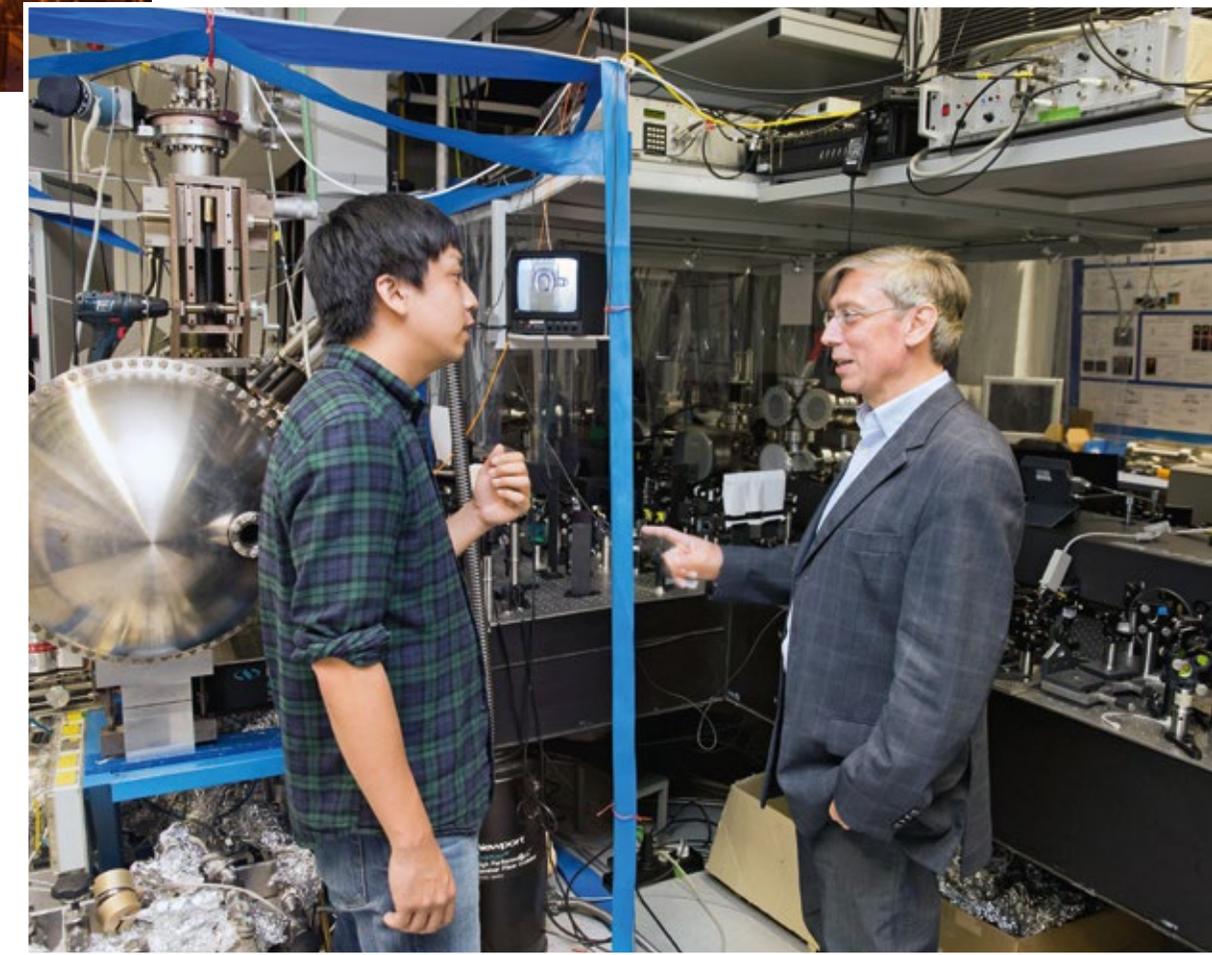
Eine gute Infrastruktur technischer Geräte ist die Voraussetzung für exzellente Forschung. Daher profitiert der Sonderforschungsbereich „Struktur und Dynamik innerer Grenzflächen“ in besonderem Maße von Infrastruktur-Investitionen an der Philipps-Universität Marburg. Hierzu zählen Apparaturen, um Schichten und innere Grenzflächen aufzubauen, sowie die Ausstattung, um diese Modellsysteme zu charakterisieren und die opto-elektronischen Eigenschaften zu untersuchen.



Am Wissenschaftlichen Zentrum für Materialwissenschaften (WZMW) hat die Universität die besondere Expertise von Physikern und Chemikern auf den Lahnbergen gebündelt. Dort forscht das Team um Prof. Kerstin Volz an Materialproben mit dem „**Scanning Transmission-Electron-Microscope**“ (STEM). Das STEM kann die Probe mit atomarer Auflösung vermessen. Die Methode gibt Aufschluss über die Atomsorte und deren exakte Lokalisierung im Material. Für viele Experimente im SFB ist das STEM daher unverzichtbar zur Strukturaufklärung. Im weiteren Verlauf des SFB wollen die Forscherinnen und Forscher die Probenvorbereitung noch weiter verbessern, um extrem dünne Schichten herzustellen und zu vermessen.



Die **Laserspektroskopie** ist in Marburg traditionell stark. Im SFB haben die Arbeitsgruppen von Ulrich Höfer und Gerson Mette sowie Robert Wallauer, ferner Martin Koch und Wolfram Heimbrodts sowie Sangam Chatterjee (jetzt JLU Gießen) ihre Methodik erfolgreich auf innere Grenzflächen übertragen. Jetzt können sie in den unterschiedlichen Arbeitspaketen die Struktur und Dynamik innerer Grenzflächenzustände, insbesondere die opto-elektronischen Effekte, gezielt untersuchen. In die apparative Ausstattung dieser Experimente gingen große Investitionen der ersten Förderperiode des SFB.



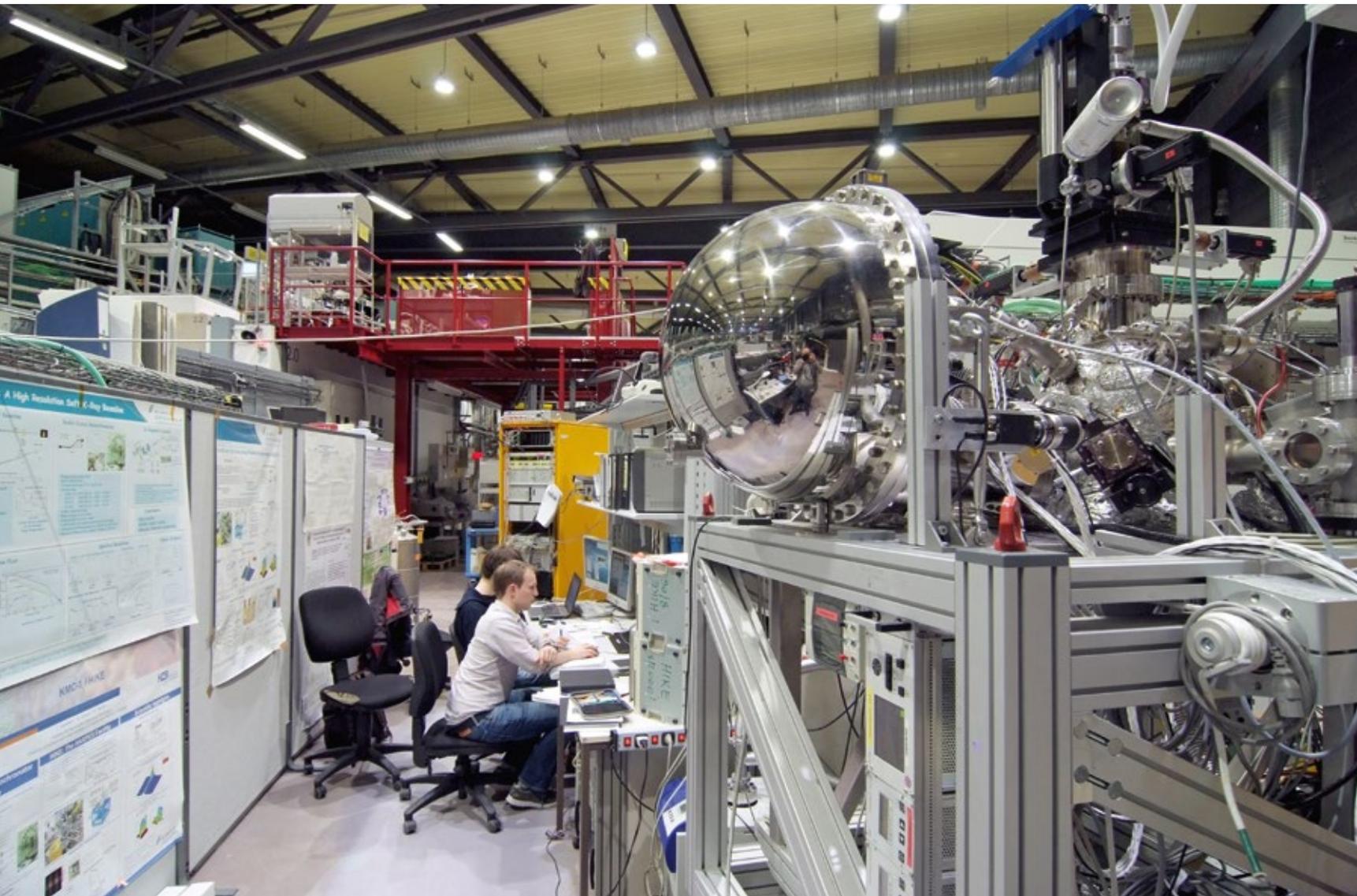
Die Möglichkeiten der Photoelektronenspektroskopie werden in der zweiten Förderperiode mit der Unterstützung des neuen Teilprojekts A12 aus Jülich nochmals deutlich erweitert. Hierzu wurde bereits gemeinsam ein spezielles Photoemissionselektronenmikroskop (PEEM) in Marburg aufgebaut, das nun durch den Gebrauch **hoher harmonischer Laserfrequenzen** auch für die **zeitaufgelöste Photoemissionstomographie** Verwendung finden soll.

Komplementär zur optischen Photoelektronenspektroskopie ist die Anregung mit Röntgenstrahlung, die weitere Energiebereiche und Informationstiefen in Schichten erschließt. Am **Berliner Elektronensynchrotron BESSY II** und am **britischen Synchrotron Diamond bei Oxford** betreiben gleich drei Arbeitsgruppen Experimente für den SFB.

Die Röntgenstrahlung löst beispielsweise aus den Materialproben hochenergetische Elektronen heraus, deren physikalische Signatur Auskunft über chemische Zusammensetzung und Struktur des Materials und seiner Grenzfläche gibt.

Zur weiteren Grundausstattung im SFB zählen Probenpräparation, Vakuumapparaturen, Röntgendiffraktometer und Rechencluster. Halbleiter-Heterostrukturen stellen die Forscher beispielsweise in **Epitaxie-Anlagen (MOVPE)** her. Die Experimente an den Grenzflächen finden dann meist im Ultrahochvakuum statt, da dies die beste Kontrolle der Probenparameter erlaubt. Ein klassisches Instrument der

Strukturanalyse ist etwa das **Röntgendiffraktometer (XRD)**, um den Materialaufbau zu entschlüsseln. Und natürlich benötigen die Theoretiker im SFB je nach Fragestellung eine große Bandbreite an **Rechenleistung**, die reicht vom Rechencluster der Universität bis zu den nationalen Höchstleistungsrechenzentren.



Projektübersicht

Projekttitle und verantwortliche Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler

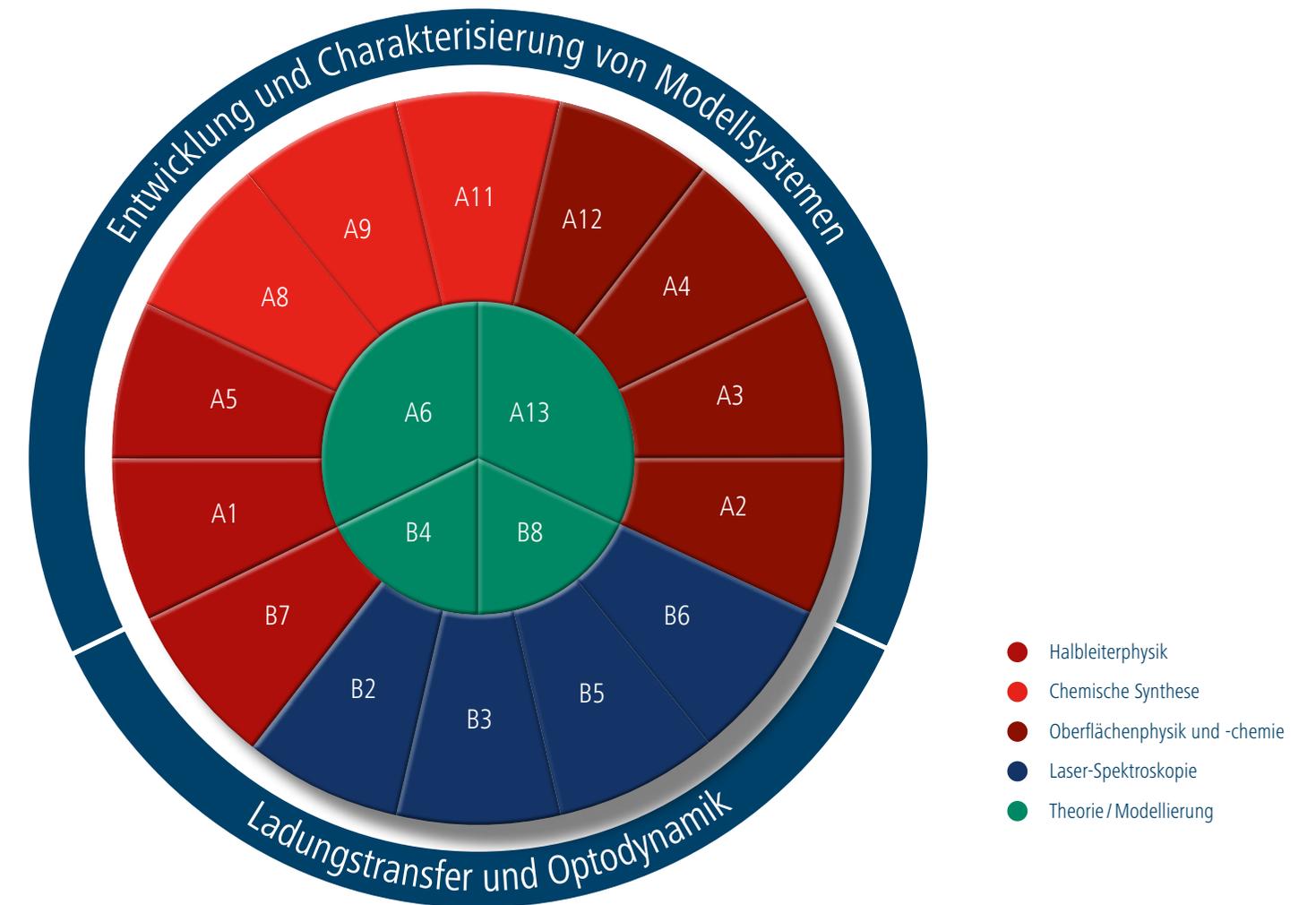
A1	Prof. Dr. Wolfgang Stolz	Metallorganische Gasphasenepitaxie von Halbleiter-Heterostrukturen und -grenzflächen Metal organic vapour phase epitaxy of semiconductor heterostructures and interfaces	Experimentalphysik
A2	Prof. Dr. Gregor Witte	Organisch/anorganische und organisch/organische Grenzflächen: Struktur und Ladungsträgertransport Inorganic/organic and organic/organic interfaces: structure and charge transport	Experimentalphysik
A3	Prof. Dr. Peter Jakob	Grenzflächen organischer Heteroschichtsysteme: Struktur und Vibrationsanregungen Organic heterolayer interfaces: structure and vibrational excitations	Experimentalphysik
A4	Prof. Dr. Michael Gottfried Dr. Martin Schmid	Reaktivität, Energetik und Struktur von vergrabenen Organik/Metall-Grenzflächen Reactivity, energetics and structure of buried organic/metal interfaces	Physikalische Chemie
A5	Prof. Dr. Kerstin Volz	Atomar aufgelöste Struktur vergrabener Grenzflächen zwischen Festkörpern Atomically resolved structure of solid/solid interfaces	Experimentalphysik
A6	PD Dr. Ralf Tonner	Gemeinsame Beschreibung von chemischer Bindung und Wechselwirkungen an Anorganik/Organik-Grenzflächen mittels Dichtefunktionaltheorie Unified density functional description of bonding and interactions at inorganic/organic interfaces	Theoretische Chemie
A8	Prof. Dr. Ulrich Koert Prof. Dr. Michael Dürr (Gießen)	Organische Moleküle als Bausteine für die Synthese innerer Grenzflächen Organic molecular building blocks for the synthesis of internal interfaces	Organische Chemie/ Experimentalphysik
A9	Prof. Dr. Stefanie Dehnen	Synthese und Eigenschaften von molekularen anorganisch/anorganisch/organischen Multilayer-Clustern Synthesis and properties of molecular inorganic/inorganic/organic multilayer clusters	Anorganische Chemie
A11	Dr. Johanna Heine	Bismut(III)-iodid als 2D-Material für Hybridverbindungen Bismuth(III)iodide as a 2D material for hybrid compounds	Anorganische Chemie

A12	Prof. Dr. Stefan F. Tautz Dr. François C. Bocquet Prof. Dr. Christian Kumpf (alle FZ Jülich)	Struktur und Phononen von hetero-epitaktischen Schichtsystemen aus schwach wechselwirkenden 2D-Materialien und molekularen Schichten Structure and phonons of hetero-epitaxial stacks of weakly interacting 2D materials and molecular layers	Experimentalphysik
A13	Prof. Dr. Michael Rohlfing (Münster)	Theorie elektronischer Grenzflächen-Zustände in schwach gebundenen Heterostrukturen Theory of electronic interface states in weakly bound heterostructures	Theoretische Physik
B2	Prof. Dr. Sangam Chatterjee (Gießen)	Ultrakurzzeitspektroskopie und Kontrolle von Anregungen an inneren Grenzflächen Ultrafast spectroscopy and control of excitations across internal interfaces	Experimentalphysik
B3	Prof. Dr. Martin Koch Prof. Dr. Wolfram Heimbrot	Zeitaufgelöste Terahertz- und optische Spektroskopie an vergrabenen Grenzflächen THz- and time-resolved optical spectroscopy of buried interfaces	Experimentalphysik
B4	Prof. Dr. Stephan W. Koch	Mikroskopische Theorie der optischen Anregungen in grenzflächendominierten Materialsystemen Microscopic theory of optical excitations in interface-dominated material systems	Theoretische Physik
B5	Prof. Dr. Ulrich Höfer Dr. Gerson Mette	Zeitaufgelöste nichtlineare optische Spektroskopie an Halbleitergrenzflächen Time-resolved nonlinear optical spectroscopy at semiconductor interfaces	Experimentalphysik
B6	Prof. Dr. Ulrich Höfer Dr. Robert Wallauer	Untersuchungen der Elektronen- und Exzitonendynamik an Grenzflächen mit Hilfe der zeitaufgelösten Zweiphotonenphotoemission Time-resolved two-photon photoemission studies of interface electron and exciton dynamics	Experimentalphysik
B7	Prof. Dr. Wolfgang Stolz Prof. Dr. Stephan W. Koch	Grenzflächendominierte Halbleiter-Laserstrukturen Interface-dominated semiconductor laser structures	Experimentalphysik/ Theoretische Physik
B8	Prof. Dr. Robert Berger	Quantenchemie für molekulare Schwingungs- und elektronische Übergänge an organischen Grenzflächen Quantum chemistry for molecular vibrational and electronic transitions at organic interfaces	Theoretische Chemie

Projektübersicht

Materialien und Methoden

		Anorganik/Anorganik	2D Grenzflächen	Metall/Organik	Organik/Organik	Anorganik/Organik	Chemische Synthese	Epitaktisches Wachstum	Strukturanalyse	Optische Spektroskopie	Theorie / Modellierung
A1	Prof. Dr. Wolfgang Stolz	●						●	●	●	
A2	Prof. Dr. Gregor Witte			●	●	●		●	●		
A3	Prof. Dr. Peter Jakob			●	●			●	●	●	
A4	Prof. Dr. Michael Gottfried, Dr. Martin Schmid			●				●	●		
A5	Prof. Dr. Kerstin Volz	●				●		●		●	
A6	PD Dr. Ralf Tonner	●				●				●	
A8	Prof. Dr. Ulrich Koert, Prof. Dr. Michael Dürr				●	●	●	●	●		
A9	Prof. Dr. Stefanie Dehnen		●			●	●	●			
A11	Dr. Johanna Heine		●			●	●	●			
A12	Prof. Dr. F. Stefan Tautz, Dr. François C. Bocquet, Prof. Dr. Christian Kumpf		●	●			●	●			
A13	Prof. Dr. Michael Rohlfing		●	●						●	
B2	Prof. Dr. Sangam Chatterjee				●	●				●	
B3	Prof. Dr. Martin Koch, Prof. Dr. Wolfram Heimbrot	●								●	
B4	Prof. Dr. Stephan W. Koch	●	●								●
B5	Prof. Dr. Ulrich Höfer, Dr. Gerson Mette	●	●			●				●	
B6	Prof. Dr. Ulrich Höfer, Dr. Robert Wallauer		●	●	●	●	●		●	●	
B7	Prof. Dr. Wolfgang Stolz, Prof. Dr. Stephan W. Koch	●						●	●	●	
B8	Prof. Dr. Robert Berger				●	●					●



Zahlen & Fakten

Sprecher:
Professor Dr. Ulrich Höfer

Strukturkommission:
Prof. Dr. Kerstin Volz (Vizesprecherin)
Prof. Dr. Stephan W. Koch
Prof. Dr. Ulrich Koert
Prof. Dr. Stefan Tautz

Fördermittel DFG	1. Förderperiode	2. Förderperiode
Personalmittel		
Postdoktoranden	1.164.500	1.231.200
Doktoranden	3.224.000	4.557.600
Nichtwissenschaftliche Mitarbeiter	120.000	141.600
Hilfskräfte	146.300	184.800
	4.654.800	6.115.200
Sachmittel		
Geräte bis 10.000€, Software und Verbrauchsmaterial	859.100	903.700
Geräte bis 50.000€	169.500	142.100
Geräte über 50.000€	557.300	123.200
Zentrale Mittel	1.027.000	1.435.500
	2.612.900	2.604.500
Programmpauschale	1.453.400	1.918.800
Fördermittel DFG gesamt	8.721.100	10.638.500

Personalstellen finanziert durch die DFG	1. Förderperiode	2. Förderperiode
Postdoktoranden	5	4
Doktoranden	20	24
Nichtwissenschaftliche Mitarbeiter	1	2
(Studentische) Hilfskräfte	7	7
	33	37

Grundausstattung Forschungsausrüstung	1. Förderperiode	2. Förderperiode
Bund/Länder Großgeräteprogramm	3.286.000	1.800.000
Sachmittel Universität Marburg	489.400	574.400
Sachmittel der übrigen beteiligten Institutionen	24.000	96.000

Mitarbeiter Universität & DFG finanziert	1. Förderperiode	2. Förderperiode
Projektleiter	19	24
davon Nachwuchsgruppenleiter	2	6
Assoziierte Mitglieder	7	8
Postdoktoranden	12	10
Doktoranden	40	46
Weitere Wissenschaftler	2	5
Nichtwissenschaftliche Mitarbeiter	31	36
Masteranden	19	26
(Studentische) Hilfskräfte	9	14

Veröffentlichungen	1. Förderperiode
Gesamtzahl	174
Mit Beteiligung von zwei und mehr Teilprojekten	52
Mit Beteiligung von drei und mehr Teilprojekten	21

Wissenschaftlicher Austausch	1. Förderperiode
Ausgerichtete Internationale Konferenzen, Symposia	8
Interne Workshops	20
Ausgerichtete Kolloquia und Seminare	77
Vom SFB eingeladene Sprecher	154
Gastwissenschaftler	53
Besuchte internationale Konferenzen	116
Eingeladene Vorträge von SFB-Mitgliedern	64

Weiteres	1. Förderperiode
Wissenschaftspreise und Auszeichnungen	31
Rufe von SFB Mitgliedern auf Professuren	8
Erfolgreich abgeschlossene Promotionen	39

1. Förderperiode: 01.10.2013 – 30.06.2017
2. Förderperiode: 01.07.2017 – 30.06.2021

Impressum

SFB 1083

Sonderforschungsbereich 1083
Philipps-Universität Marburg
Renthof 5
35032 Marburg

Redaktion:

Dr. Helen A. Pfuhl, SFB 1083 Geschäftsstelle
Dr. Andreas Namgalies, Philipps-Universität Marburg
Prof. Dr. Stefanie Dehnen, Philipps-Universität Marburg
Martin Schäfer, martin.schaefer@euroscience.net

Gestaltung und Satz:

Bosse und Meinhard Wissen und Kommunikation, Bonn

SFB 1083

Sonderforschungsbereich 1083
Philipps-Universität Marburg
Renthof 5
35032 Marburg

www.internal-interfaces.de