

O 6: Semiconductor substrates: Adsorption

Time: Monday 11:15–13:00

Location: WIL B122

O 6.1 Mon 11:15 WIL B122

Silber-induzierte Vorstrukturierung vicinaler Si-Oberflächen für das Wachstum von Ge-Nanostrukturen — ●INGA HEIDMANN¹, MORITZ SPECKMANN¹, THOMAS SCHMIDT¹, MIGUEL ANGEL NIÑO ORTI², TEVFIK ONUR MENTES², ANDREA LOCATELLI² and JENS FALTA¹ — ¹Institut für Festkörperphysik, Universität Bremen, 28359 Bremen — ²Sincrotrone Trieste, 34 149 Basovizza/Trieste, Italien

Der Einsatz von Adsorbaten ist ein vielversprechender Ansatz, das Wachstum von Ge-Nanostrukturen auf Si-Oberflächen durch Vorstrukturierung der Substratoberfläche und Modifikation des Wachstums selbst gezielt zu beeinflussen. Zu diesem Zweck kamen verschiedene oberflächensensitive Methoden wie hochauflösende niederenergetische Elektronenbeugung (SPA-LEED), niederenergetische Elektronenmikroskopie (LEEM) sowie Rasterelektronenmikroskopie (SEM) zur Anwendung. Während zur Vorstrukturierung bisher verstärkt Adsorbate aus den III. und V. Hauptgruppen untersucht wurden, wurde in diesem Fall das Adsorptionsverhalten von wenigen Monolagen Silber auf der Si(112)- sowie Si(113)-Oberfläche charakterisiert. Hierbei konnte jeweils eine Ausbildung von regelmäßigen Nanofacetten festgestellt werden. Zudem wurde der Einfluss der mit Silber vorstrukturierten Oberflächen auf das anschließende Ge-Wachstum analysiert, wobei anisotrope Inseln mit einer verstärkten Ausrichtung entlang der Facetten beobachtet werden konnten.

O 6.2 Mon 11:30 WIL B122

In situ surface analysis of Ge(100) for III-V heteroepitaxy — ●SEBASTIAN BRÜCKNER¹, ENRIQUE BARRIGÓN², OLIVER SUPPLIE¹, JOHANNES LUCZAK¹, PETER KLEINSCHMIDT¹, HENNING DÖSCHER¹, IGNACIO REY-STOLLE², CARLOS ALGORA², and THOMAS HANNAPPEL¹ — ¹Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie, Hahn-Meitner-Platz 1, 14109 Berlin, Germany — ²Instituto de Energía Solar, Universidad Politécnica de Madrid, ETSI de Telecomunicación, Avda. Complutense s/n, 28040 Madrid, Spain

Ge(100) is the established substrate for current world record III-V triple junction solar cells. However, uncertainties still remain regarding the atomic surface structure of the Ge(100) substrates prior to the MOVPE III-V heteroepitaxy. Here, we have applied in situ reflectance anisotropy spectroscopy (RAS) to study the influence of different group V precursors and reactor background contaminations on Ge(100) surfaces, that affect the subsequent III-V layer growth. A contamination free MOVPE to UHV transfer system allowed us to analyse different Ge(100) surfaces with various UHV based surface sensitive techniques such as x-ray photo electron spectroscopy (XPS), low energy electron diffraction (LEED), and scanning tunneling microscopy (STM). In this way, we were able to correlate the results of these surface analysis with the characteristic in situ RA spectra of the different clean, As and P terminated Ge surfaces. For instance, XPS measurements confirmed oxide removal and the corresponding termination. On the other hand, LEED measurements showed the influence of group V precursors and background As pressure on the surface reconstruction.

O 6.3 Mon 11:45 WIL B122

Strukturelle Untersuchungen zur Ga-Adsorption auf Si(110) — ●TORSTEN WILKENS, THOMAS SCHMIDT und JENS FALTA — Institut für Festkörperphysik, Universität Bremen, 28359 Bremen

Niederdimensionale Halbleiterstrukturen wie Quantendrähte versprechen vielfältige Anwendungsmöglichkeiten. Eine Methode der Herstellung solcher Nanostrukturen ist die Abscheidung sich selbstorganisierender Strukturen auf neuartigen Template-Substraten. In diesem Kontext wurde die Adsorption von Gallium auf der 16×2 -rekonstruierten Si(110)-Oberfläche mit Hilfe von Rastertunnelmikroskopie (STM) und hochauflösender niederenergetischer Elektronenbeugung (HR-LEED) untersucht.

Als Ergebnis dieser Messungen werden erste Aufnahmen der Ga-terminierten Si(110)-Oberfläche im Realraum präsentiert, welche eine $3\sqrt{3} \times \sqrt{3} - R54, 7^\circ$ -Rekonstruktion zeigen mit in zwei Domänen ausgerichteten Streifen, deren mit HR-LEED bestimmten Orientierungen exakt senkrecht zu den Ausrichtungen der Streifen der darunter liegenden 16×2 -Rekonstruktion sind, also in Richtung $\langle 1\bar{1}1 \rangle$ und $\langle \bar{1}11 \rangle$. Darüber hinaus belegen die STM-Messungen eine vollständige Bedeckung der Oberfläche unabhängig davon, ob zuvor unrekonstruierte Bereiche

vorlagen oder nicht. Mit Hilfe hochauflösender STM-Aufnahmen lassen sich die Streifen der $3\sqrt{3} \times \sqrt{3} - R54, 7^\circ$ -Rekonstruktion als Aneinanderreihung rechteckiger Einheiten sichtbar machen. Diese Rechtecke wiederum existieren in zwei unterschiedlichen Ausdehnungen, wobei der breitere der beiden Typen eine bevorzugte Anordnung in Ketten senkrecht zu den Streifen zeigt.

O 6.4 Mon 12:00 WIL B122

Adsorption dynamics of ethylene on Si(001) — ●MARCUS LIPPONER¹, NICO ARMBRUST¹, MICHAEL DÜRR^{1,2}, and ULRICH HÖFER¹ — ¹Philipps Universität, D-35037 Marburg — ²Hochschule Esslingen, D-73728 Esslingen

The functionalization of semiconductor surfaces by means of organic molecules is of great interest due to possible applications in the field of nanoelectronics. However, only little information on the reaction dynamics of these systems is available. In this work, the adsorption dynamics of ethylene on Si(001) has been investigated. With ethylene being the most simple unsaturated organic molecule, the system serves as a model system for non-activated adsorption on semiconductor surfaces. In order to investigate its reaction dynamics, we employed a supersonic molecular beam which allows for the control of the kinetic energy of the impinging molecules. Additionally, surface temperature and the excitation of internal degrees of freedom were varied when measuring the sticking coefficients as a function of relative surface coverage by means of King and Wells techniques. With increasing kinetic energy of the impinging molecules, we find a decrease of the initial sticking coefficient as it is typical for non-activated reaction channels; with increasing surface temperature a decrease of the initial sticking coefficient is observed. Surprisingly, the maximum surface coverage also decreases with increasing surface temperature. The excitation of the internal degrees of freedom is shown to have a minor impact on the reactivity. The results are discussed in the context of a reaction channel via a mobile precursor.

O 6.5 Mon 12:15 WIL B122

Adsorption of small organic ring molecules on GaP(001)(2x4) — ●MARCEL EWALD^{1,2}, JOHANNES FALKENBURG^{1,2}, MICHAEL KNEISSL¹, NORBERT ESSER², and PATRICK VOGT¹ — ¹Technische Universität Berlin, Institut für Festkörperphysik, Hardenbergstr. 36, 10623 Berlin — ²Leibniz-Institut für Analytische Wissenschaften - ISAS - e.V., Department Berlin, Albert-Einstein-Str. 9, 12489 Berlin

For the application of organic/semiconductor interfaces, in particular of III-V compounds, the interface atomic formation and structure are crucially important. We have investigated the binding configuration and binding structure of small organic ring molecules like cyclopentene, pyridazine and pyrrole on the GaP(001)(2x4) surface reconstruction. The molecule terminated samples were analysed by low energy electron diffraction (LEED), X-ray photoemission spectroscopy (XPS) and reflectance anisotropy spectroscopy (RAS) in a spectral range from 1.5eV to 8.5eV. We found, that the different molecules lead to different contributions within the optical anisotropy between 6-8eV resulting from the different electronic properties of the molecules. Numerical analysis of the C1s core level indicates different adsorption geometries of molecule and the GaP(001)(2x4) surface.

O 6.6 Mon 12:30 WIL B122

First-principles study of the organic/ZnO (000 $\bar{1}$)-O interface: the role of van der Waals interactions — ●YONG XU, PATRICK RINKE, OLIVER HOFMANN, and MATTHIAS SCHEFFLER — Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft, Berlin, Germany

Hybrid inorganic/organic materials have opened up new opportunities for the development of optoelectronics, benefiting from the potential to combine the best features of two distinct material classes. The understanding of their interfacial properties is of critical importance to develop new basic concepts for optoelectronic devices or to optimize device designs. In this work, we studied the interface between the ZnO (000 $\bar{1}$)-O surface and a prototypical organic acceptor 2,3,5,6-tetrafluoro-7,7,8,8-tetracyanoquinodimethane (F4TCNQ) by first-principles approaches implemented in the FHI-aims code, focusing on the effects of van der Waals (vdW) interactions. We applied and compared various methods to treat vdW interactions, including the non-local Langreth-Lundqvist exchange-correlation func-

tional, exact-exchange plus correlation in the random phase approximation (RPA), and the $C_6[n]/R^6$ correction approach by Tkatchenko and Scheffler. While F4TCNQ binds strongly to the clean ZnO (0001)-Zn surface density-functional theory (DFT) with the PBE exchange-correlation functional gives only weak physical adsorption on the ZnO (0001)-O surface. VdW corrections pull the molecule closer to the surface and considerably enhance the binding energy, emphasizing the importance of vdW interactions for this material class.

O 6.7 Mon 12:45 WIL B122

Hydrogen Adsorption on polar ZnO(0001)-Zn - extending equilibrium surface phase diagrams to kinetically stabilised structures — ●MIRA TODOROVA¹, MARKUS VALTINER^{2,3}, and JÖRG NEUGEBAUER¹ — ¹Dept. for Computational Materials Design, Max-Planck-Institut für Eisenforschung GmbH, Düsseldorf — ²Dept. for

Interface Chemistry and Surface Engineering, Max-Planck-Institut für Eisenforschung GmbH, Düsseldorf — ³Dept. for Chemical Engineering, University of California, Santa Barbara, CA 93106-5080, USA

Hydrogen adsorption on the Zn-terminated polar ZnO(0001) surface is studied by a combination of density-functional theory calculations and *atomistic thermodynamics*. Going beyond the thermodynamic limit and constructing meta-stable phase diagrams we extend the concept of equilibrium surface phase diagrams to include kinetically stabilised surface reconstructions. Using this approach we were able to identify new and hitherto not reported structures that become stable under non-equilibrium extreme H-rich conditions. Experimental situations that realise such conditions will be discussed.

M. Valtiner, M. Todorova, and J. Neugebauer, Phys. Rev. B **82**, 165418 (2010).