



BERGISCHE  
UNIVERSITÄT  
WUPPERTAL

BERGISCHE UNIVERSITÄT WUPPERTAL

FORTGESCHRITTENEN PRAKTIKUM

---

# Rastertunnelmikroskopie

---

*Verfasser:*

Henrik JÜRGENS

Frederik STROTHMANN

*Tutor:*

Vitali PORSHYN

**Abstract:**

Mithilfe eines Rastertunnelmikroskops wird die Struktur verschiedener Materialien analysiert, indem deren Oberfläche in verschiedenen Modi abgerastert wird.

Bereich	max. %	+ / 0 / -	erreicht %
Einleitung & Theorie	15		
Durchführung	70		
Auswertung			
phys. Diskussion			
Zusammenfassung			
Formales	15		
Note			

12. Oktober 2015

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>2</b>
<b>2</b>	<b>Theorie</b>	<b>2</b>
2.1	Tunneleffekt . . . . .	2
2.2	Oberflächenrauheit . . . . .	3
2.3	Struktur der Proben . . . . .	4
2.3.1	Graphit . . . . .	4
2.3.2	Gold . . . . .	5
<b>3</b>	<b>Versuchsaufbau</b>	<b>5</b>
3.1	Betriebsmodi . . . . .	7
3.1.1	Constant Current Mode . . . . .	7
3.1.2	Constant Hight Mode . . . . .	8
<b>4</b>	<b>Versuchsdurchführung und Auswertung</b>	<b>9</b>
4.1	Graphit . . . . .	9
4.1.1	Rauheit . . . . .	10
4.1.2	Gitterstruktur und Elektronendichteverteilung . . . . .	11
4.1.3	Mittlerer Atomabstand . . . . .	14
4.1.4	Diskussion . . . . .	16
4.2	(111)-Goldschicht . . . . .	17
4.2.1	Rauheit . . . . .	18
4.2.2	Monoatomare Stufen und Gitterdefekte . . . . .	19
4.2.3	Diskussion . . . . .	21
<b>5</b>	<b>Fazit</b>	<b>21</b>
<b>6</b>	<b>Anhang</b>	<b>22</b>

# 1 Einleitung

In diesem Versuch werden Oberflächen verschiedener Proben mittels Rastertunnelmikroskopie auf deren Gitterstruktur und morphologische Eigenschaften untersucht. Elektronendichte, Oberflächenrauheit und die atomare Gitterstruktur können mit dem Rastertunnelmikroskop (RTM) analysiert werden. Der quantenmechanische Tunneleffekt wird genutzt, um leitende Materialien zu untersuchen. Indem zwischen einer einatomigen Platin-Iridium-Elektrode und der zu untersuchenden Probe eine Potentialdifferenz angelegt wird, kommt es abhängig von der Entfernung der Pt-Ir-Elektrode zur Probe und dessen Elektronendichte zu einem Tunnelstrom, welcher Rückschlüsse auf die Struktur der Probe erlaubt. Die Elektronendichte der Oberfläche kann durch systematisches Abrastern der Probe erfasst werden, sodass mithilfe verschiedener Modi (CC und CH: Constant Current und Constant Height) ein Bild der Materialoberfläche entsteht.

## 2 Theorie

In diesem Versuchsteil werden die für diesen Versuch wichtigen theoretischen Grundlagen erklärt.

### 2.1 Tunneleffekt

Der Tunneleffekt, auf dem die Funktionsweise des RTM basiert, kann nichtrelativistisch mit der stationären Schrödingergleichung für Materiewellen beschrieben werden.

$$E\psi = \hat{H}\psi \quad (1)$$

Über das Korrespondenzprinzip erhält man aus dem klassischen nichtrelativistischen Hamiltonian für ein Teilchen im Potential  $V$  die Ortsdarstellung der Schrödingergleichung:

$$E\psi = \left( \frac{-\hbar^2 \Delta}{2m} + V \right) \psi \quad (2)$$

$|\psi|^2$  gibt dabei die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens im Volumenelement  $dV(\mathbf{x})$  an. Der Tunneleffekt kann anhand eines einfachen Beispiels verstanden werden, indem in einer Dimension ein Potentialwall in Form eines Kastens angenommen wird. Ein veranschaulichendes Bild ist wichtiger, als ein langer Rechenweg, weshalb es vorzuziehen ist, die Lösung mit Abbildung 1 zu veranschaulichen.



Abbildung 1: Eindimensionale Schrödingergleichung mit Potentialwall in der Mitte. Zu sehen ist der exponentielle Abfall der Amplitude der Wellenfunktion, wodurch die Aufenthaltswahrscheinlichkeit hinter dem Potentialwall  $D^2$  kleiner als  $A^2$  ist. (vgl. [7])

Die Herleitung kann ohne Probleme auf der Seite [6] nachvollzogen werden. Die Lösung der Schrödingergleichung innerhalb der Potentialbarriere ergibt einen exponentiellen Abfall der Aufenthaltswahrscheinlichkeit mit zunehmender Eindringtiefe, wobei die Wellenlänge gleich bleibt. Damit die Elektronen während des Versuches nicht in beide Richtungen gleich stark tunneln, wird eine Potentialdifferenz zwischen Bereich (I) und Bereich (III) erzeugt, wodurch die Elektronen eine Vorzugsrichtung bekommen. Der Tunnelstrom  $I_{Tunnel}$ , die entscheidende Messgröße, ist proportional zur Tunnelwahrscheinlichkeit multipliziert mit der angelegten Spannung  $V_{bias}$  und der Zustandsdichte  $\rho_s$  bei der Fermienergie  $E_f$ . Die Differenz der Austrittsarbeiten der Materialien wird mit  $\Phi$  bezeichnet, wobei  $z$  der Abstand der Sonde zum Material ist:

$$I_{Tunnel} \propto V_{bias} \rho_s(E_f) \exp \left[ -2 \frac{\sqrt{2m(\Phi - E)} z}{\hbar} \right] \approx V_{bias} \rho_s(E_f) \exp \left[ -1,025 \sqrt{\Phi} z \right] \quad (3)$$

Die zweite Näherung gilt, falls die Potentialbarriere  $\Phi \gg E$  ist und die erste Proportionalität gilt. Die erste Proportionalität ist dabei selber eine Näherung für  $2 \frac{\sqrt{2m(\Phi - E)} z}{\hbar} \gg 1$ , da die nicht genäherte Tunnelwahrscheinlichkeit

$$W_{Tunnel} = \frac{1}{1 + \frac{\Phi^2}{4E(\Phi - E)} \sinh^2 \left( \frac{\sqrt{2m(\Phi - E)} z}{\hbar} \right)} \quad (4)$$

entspricht. Die starke  $z$ -Abhängigkeit wird in diesem Versuch ausgenutzt.

## 2.2 Oberflächenrauheit

Die Oberflächenrauheit oder kurz Rauheit ist in der Oberflächenphysik eine Größe zur Charakterisierung der Unebenheit der Oberflächenhöhe. Beschrieben wird sie mit der mittleren

betragsmäßigen Abweichung von der mittleren Oberflächenhöhe, oder mit der mittleren quadratischen Abweichung von der Oberflächenhöhe. Die Formeln sind im Zweidimensionalen, wie auch im Dreidimensionalen, auf Hyperflächen anwendbar. Für die Berechnung der Rauheit wird Formel 5 und Formel 6 für das arithmetische Mittel  $R_a$  und für das quadratische Mittel  $R_q$  verwendet.

$$R_a = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |z_i - \bar{z}| \quad (5)$$

$$R_q = \frac{1}{N} \sqrt{\sum_{i=1}^N (z_i - \bar{z})^2} \quad (6)$$

Das quadratische Mittel gewichtet größere Abweichungen stärker als das arithmetische Mittel. Der Mittelwert  $\bar{z}$  wird über Formel 7 bestimmt.

$$\bar{z} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N z_i \quad (7)$$

Zur Unterscheidung wird die mittlere Flächenrauheit im Versuch mit dem Buchstaben S benannt ( $S_a$  und  $S_q$ ) und die mittlere Linienrauheit behält den Namen R ( $R_a$  und  $R_q$ ).

## 2.3 Struktur der Proben

Alle in diesem Versuch untersuchten Materialien (Gold und Graphit) sind Leiter. Sie unterscheiden sich jedoch in der Elektronenkonfiguration. Es gibt einen Unterschied zwischen der Verteilung der Elektronen in Metallen und Halbleitern. Die Elektronen von Metallen und Halbleitern können im periodischen Potential der Atomrümpfe z.B. mit der Schrödingergleichung und einigen Annahmen analysiert werden. Es stellt sich heraus, dass sogenannte verbotene Zonen (Bandlücken) entstehen. Die Energieniveaus, die mit Elektronen besetzt werden können, werden Bänder bezeichnet. Bei Metallen ist das oberste Band nicht voll besetzt, sodass sich Elektronen frei in dem Band bewegen können. Bei Halbleitern ist das oberste Band voll, sodass erst durch z.B. thermische Anregung Elektronen in ein höheres Band (Leitungsband) angeregt werden können, in welchem sie sich dann ebenfalls frei bewegen können. Das oberste nicht voll besetzte Band wird Leitungsband genannt. Es soll nun genauer auf die beiden bekannten Proben Gold und Graphit eingegangen werden.

### 2.3.1 Graphit

Die Graphitprobe ist ein HOPG (highly ordered pyrolytic graphit), ein Halbleiter mit einer hcp-Gitterstruktur. In Abbildung 2 ist die Gitterstruktur des Graphits zu sehen. In einer Ebene werden die Kohlenstoffatome aufgrund der sp<sup>2</sup>-Hybridisierung stark durch kovalente Bindungen zusammengehalten. Zwischen den Ebenen werden die Kohlenstoffatome nur von Van-der-Waals-Kräften zusammengehalten.

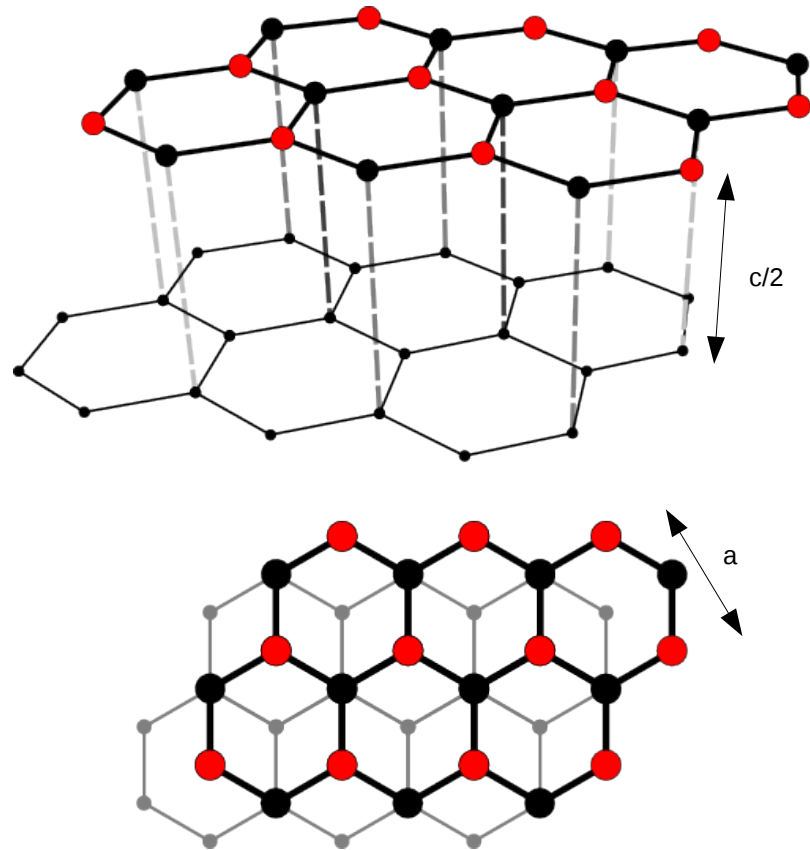


Abbildung 2: Schematische Struktur von Graphit. Die Ebenen liegen in ABAB-Form vor, sodass jede zweite Ebene gleich aufliegt. Die Ebenen untereinander besitzen an jeder zweiten Ecke des Hexagons eine Verbindung. Entnommen von [3], modifiziert

Die in Abbildung 2 eingezeichneten Gitterkonstanten haben die Werte  $a = 2.46 \text{ \AA}$  und  $c = 6.71 \text{ \AA}$  (vgl. [4]). Aufgrund ABAB-Form liegen immer drei Atome in den Hexagonalen etwas erhöht und haben so eine höhere freie elektrische Zustandsdichte. Diese Struktur ist mit dem RTM zu sehen.

### 2.3.2 Gold

Gold hat eine fcc-Kristallstruktur. Die Gitterkonstante beträgt  $a = 4.065 \text{ \AA}$  [1]. Untersucht wird die (111)-Goldschicht, wobei (111) die Millerindizes sind, die die Struktur der betrachteten Ebene des Kristalls beschreiben. Die atomare Struktur von Gold ist deutlich schwerer zu messen, da die Atome homogen verteilt sind.

## 3 Versuchsaufbau

In diesem Abschnitt wird der Aufbau des Rastertunnelmikroskops beschrieben. Das Rastertunnelmikroskop basiert auf dem in Abschnitt 2.1 beschriebenen Tunneleffekt. Die leitende Spitze

des Rastertunnelmikroskops wird hinreichend nah an die Oberfläche des zu untersuchenden Material geführt, soll diese jedoch nicht berühren. Wird eine Spannung angelegt, so fließt Abhängig vom Abstand zu 'elektronischen Oberfläche' ein "Tunnelstrom". Bewegt man die Spitze parallel zur Oberfläche, so erhält man über die Stärke des Tunnelstroms oder den Abstand der Spitze des RTM orts aufgelöste Informationen über die Oberfläche.

Grundlegend ist das Rastertunnelmikroskop aus drei Elementen aufgebaut, einem Tastkopf, einem Piezosteuererelement und einer Probe. Der Tastkopf besteht aus einem Draht mit einer Spitze, die möglichst einatomig sein soll. Durch die Dicke der Spitze wird das Auflösungsvermögen des Mikroskops festgelegt. In diesem Versuch wird ein Platin-Iridium-Draht als Tastkopf verwendet. Das Piezosteuererelement dient zur Positionierung der Spitze. Dabei kann der Tastkopf im nm-Bereich verschoben werden. Für die Untersuchung einer Oberfläche mit einem Rastertunnelmikroskop muss die Probe bestimmte Eigenschaften erfüllen. Die Probe muss ein Leiter oder ein Halbleiter sein.

Ein schematischer Versuchsaufbau ist in Abbildung 3 zu sehen.

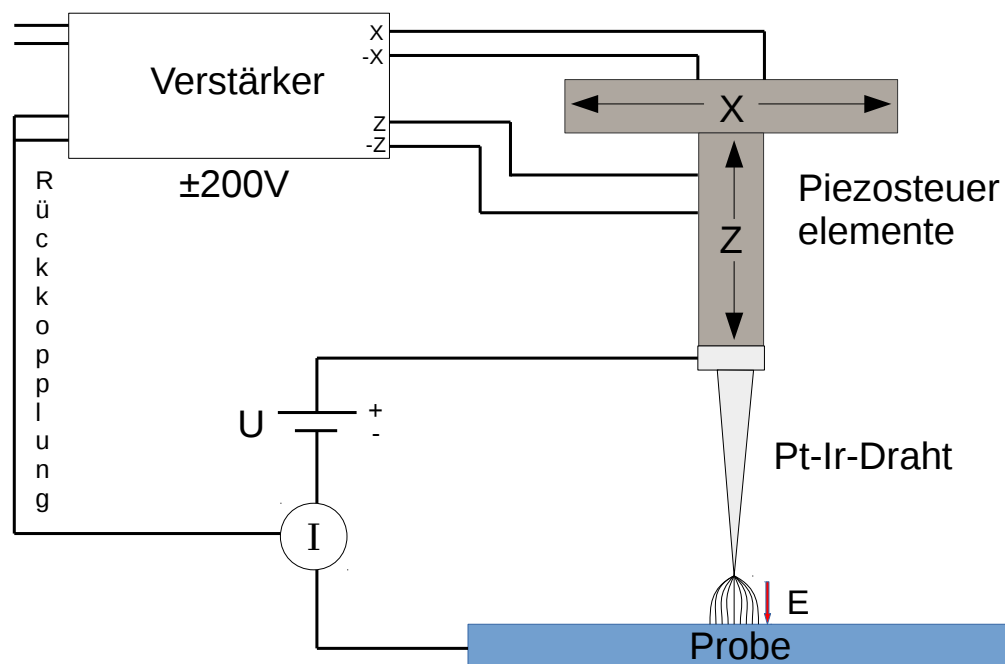


Abbildung 3: Schematische Skizze des Versuchsaufbaus. Die Positionierung des Platin-Iridium-Tastkopfes wird über die Piezoelemente im nm-Bereich gesteuert. Die Rückkopplung dient zur Steuerung der Höhe des Tastkopfes.

Da eine Spannung angelegt wird, sind die Fermi-Energien der beiden Materialien nicht mehr auf dem selben Niveau. Ist der Abstand zwischen der Spitze und dem Material hinreichend klein, so kann die Potenzialbarriere durchtunnelt werden und es fließt ein Tunnelstrom. Der Tunnelstrom wird durch den Verstärker in eine Spannung umgewandelt und kann so gemessen werden. Dabei ist die Spannung proportional zum Tunnelstrom, welcher in Abhängigkeit des Abstandes zwischen der Spitze und der Probe mit Gleichung 3 bestimmt werden kann. Die Feldstärke  $E$ , des E-Feldes zwischen der Spitze und der Probe, kann mit  $E = \frac{U}{d}$  bestimmt werden. Die

Stromdichte  $j$  erhält man durch  $j = \frac{I}{A}$ . Für die Oberfläche der Spitze wird angenommen, dass sie aus nur einem Atom besteht. Die Oberfläche lässt sich mit  $A = \pi \cdot R_{Atom}^2$  bestimmen. Für den Radius wurde ein Wert von  $1.35 \text{ \AA}$  [5] angenommen. Es ergibt sich eine Oberfläche von  $5.73 \text{ \AA}^2$ . Die Parameter und die erwarteten Werte sind in Tabelle 1 beschrieben.

Tabelle 1: Parameter mit Erwartungswerten für die Graphit und Gold.

Parameter	Gold	Graphit
tip voltage U	50mV	500mV
Tunnelstrom U	1nA	1nA
Feldstärke E	50kV/mm	500kV/mm
Stromdichte j	17,5kA/mm <sup>2</sup>	17,5kA/mm <sup>2</sup>

Anhand der Werte in Tabelle 1 kann man sehen, dass die Feldstärke und die Stromdichte sehr große Werte annehmen. Dies liegt an der geringen räumlichen Ausdehnung.

### 3.1 Betriebsmodi

Das Rastertunnelmikroskop kann in zwei Modi betrieben werden, Constant Current Mode (“Topographie”) und Constant Hight Mode (“Elektronendichte”).

#### 3.1.1 Constant Current Mode

Im Constant Current Mode wird der Abstand zwischen der Probe und dem Tastkopf konstant gehalten. Dafür wird über einen PID-Regler der Abstand so geregelt, dass der Tunnelstrom konstant bleibt. Die Information über die Oberflächenstruktur kann aus der Veränderung der z-Position entnommen werden. Eine schematische Skizze der Funktionsweise ist in Abbildung 4 zu sehen.



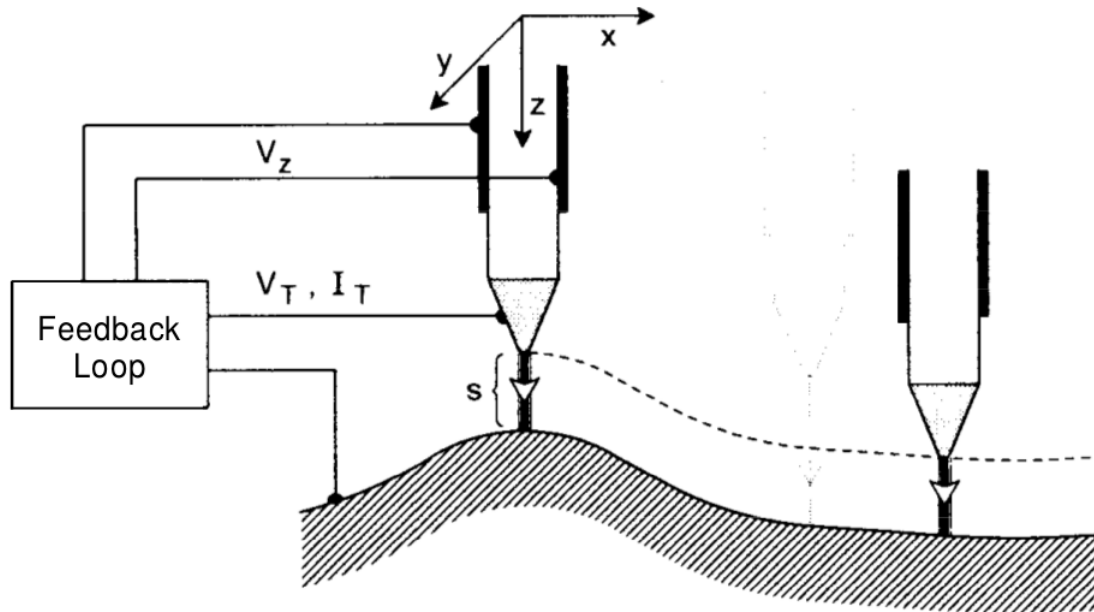


Abbildung 4: Darstellung des Constant Current Mode für das Rastertunnelmikroskop. Entnommen von [2]

### 3.1.2 Constant Hight Mode

Im Constant Hight Mode wird der (makroskopische) Abstand zwischen Probe und Tastkopf einmal eingestellt und danach nicht verändert. Bei Unebenheiten der Oberfläche kann es jedoch zu Kollisionen kommen, wodurch der Tastkopf zerstört werden kann. Der Vorteil der Messmethode ist, dass der gemessene Tunnelstrom exponentiell vom Abstand zur elektronischen Oberfläche abhängt. Eine schematische Skizze ist in Abbildung 5 dargestellt.

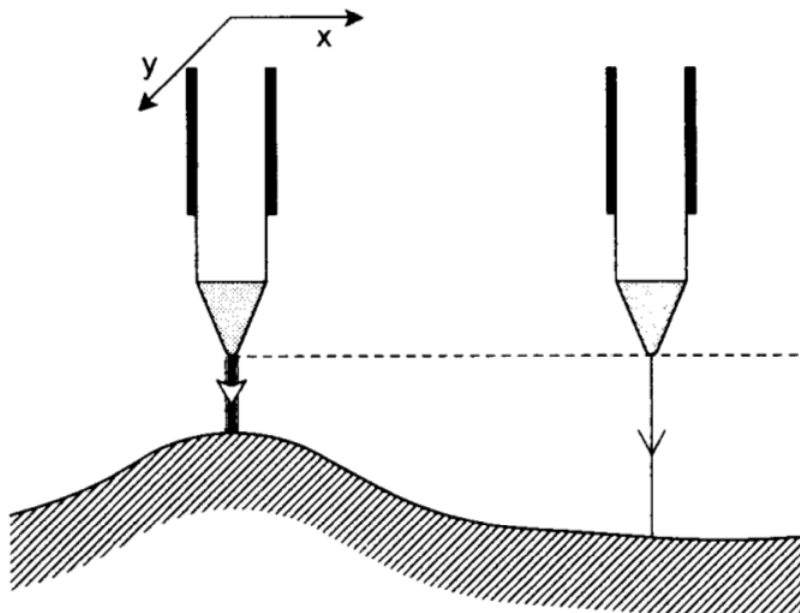


Abbildung 5: Darstellung des Constant Hight Mode für das Rastertunnelmikroskop. Entnommen von [2]

## 4 Versuchsdurchführung und Auswertung

Die mittlere Flächen- bzw. Linien-Rauheit (CC-Mode), die Gitterstruktur, die Atomabstände und im glatten Bereich die Elektronendichteverteilung von [HOPG]-Graphit (CH-Mode) soll aus den mit dem RTM gemessenen Daten bestimmt werden. Danach soll die Flächen- und Linien-Rauheit, monoatomare Stufen, Gitterfehler und Stufenhöhen, sowie Gitterparameter einer (111)-Goldschicht (CC-Mode) erfasst werden.

### 4.1 Graphit

Die Graphitschicht konnte magnetisch auf der Probenhalterung angebracht werden. Die Vorbereitungen für die Graphitmessung dauerten nicht lange, da nach wenigen Versuchen eine funktionsfähige Pt-Ir-Spitze angefertigt werden konnte. Für die Anfertigung der Pt-Ir-Spitze standen Isopropanol, Reinigungstücher, eine Pinzette und eine Zange zu halten des Drahtes. Um den Pt-Ir-Draht anzuspitzen, stand uns ein Seitenschneider zur Verfügung, mit dem der Draht angeschnitten wurde, sodass durch darauffolgendes kräftiges Ziehen eine (idealerweise) einatomige Spitze erzeugt werden konnte. Nachdem eine passende Pt-Ir-Spitze hergestellt werden konnte, wurde mit dem RTM ein Bereich von 600nm im „Topographie“-Modus (CC) abgerastert. Die dazu benötigten Einstellungen konnten mit dem Programm für das RTM eingestellt werden und sind in Tabelle 2 dargestellt.

Tabelle 2: Parameter zur Topographiemessung (CC-Mode)

Variable	Wert
Set point	1 nA
P-gain	1000
I-gain	1700
Tip-voltage	50 mV

Die Topographiemessung über 600 nm ist in Abbildung 6 dargestellt.

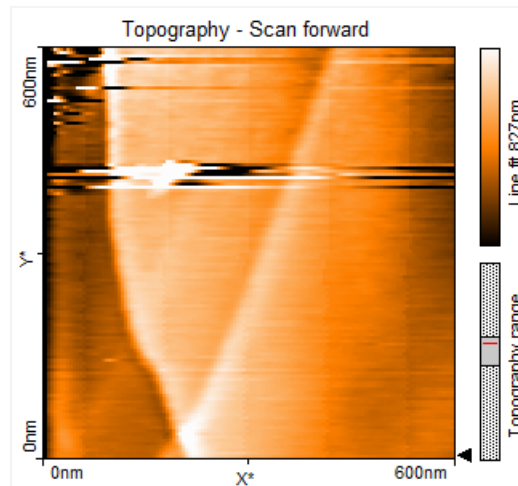


Abbildung 6: 600 nm Bild im Topographie/CC-Modus

### 4.1.1 Rauheit

Die Rauheit der Graphitschicht konnte mit der Software für das RTM bestimmt werden, nachdem die Graphitschicht im CC-Modus mit der Spitze des RTM abgerastert wurde. Die Verkipung wurde bestimmt und grob bis auf  $0.2^\circ$  korrigiert. Das Fenster Topography-Scan ist für die Messung nicht wichtig, da es die Oberflächenbeschaffenheit ausschließlich auf Höhe des schwarzen Pfeils angibt. In Abbildung 7 ist die Messung zur Bestimmung der mittleren Linienrauheit dargestellt.

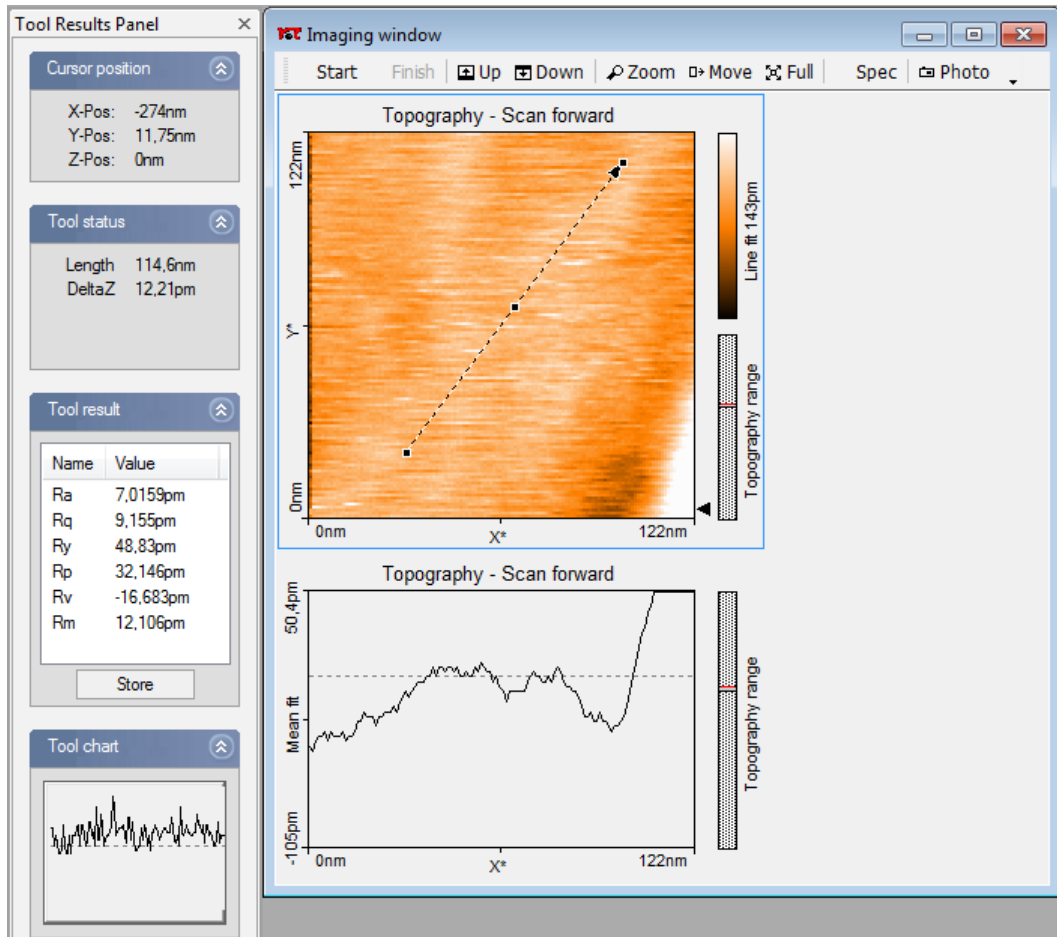


Abbildung 7: Mittlere Linienrauheit von Graphit entlang der abgebildeten Linie ( $R_a = 7.0159 \text{ pm}$  und  $R_q = 9.1550 \text{ pm}$ )

Ebenso wurde die mittlere Flächenrauheit der Graphitprobe bestimmt, welche in Abbildung 8 dargestellt ist.

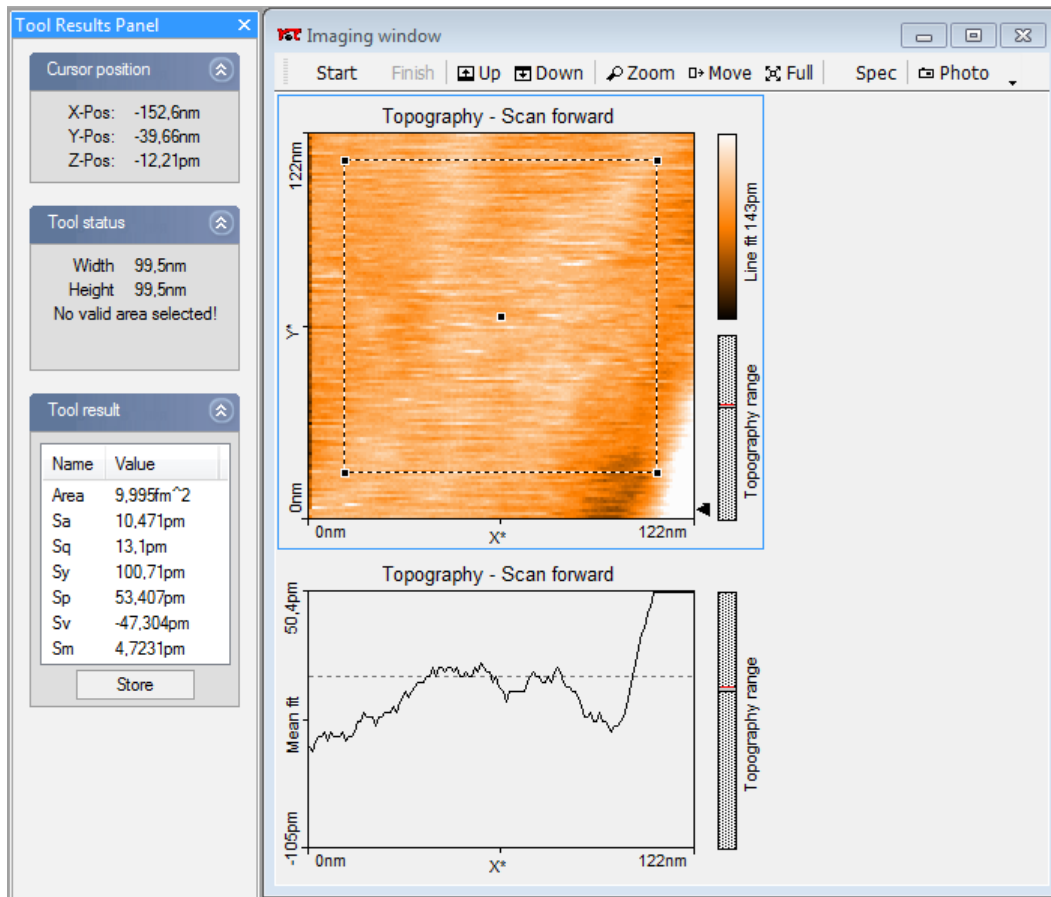
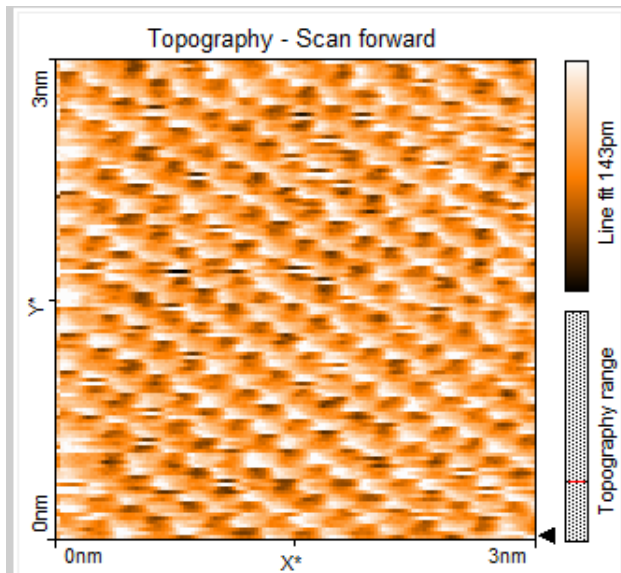


Abbildung 8: Mittlere Flächenrauheit von Graphit für die Fläche im Quadrat ( $S_a = 10.471$  pm und  $S_q = 13.100$  pm)

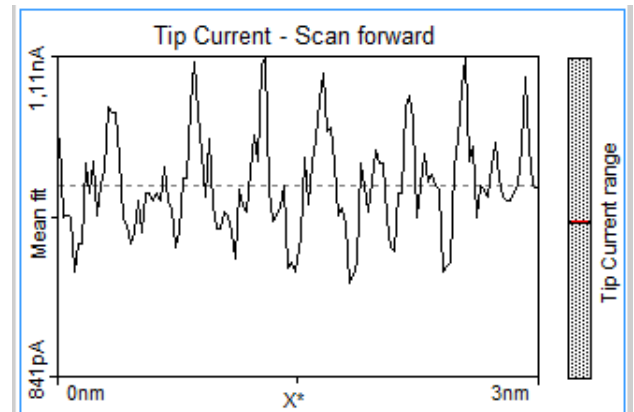
Man sieht, dass die mittlere Flächenrauheit größer als die mittlere Linienrauheit ist, wobei der Anteil der arithmetischen Rauheit an der quadratischen Rauheit bei beiden Messungen in etwa gleich groß ist ( $\frac{R_a}{R_q} = 0,78 = 78\%$  und  $\frac{S_a}{S_q} = 0,80 = 80\%$ ). Für die Linienrauheit wurde eine möglichst glatte Linie gewählt, wodurch der Unterschied zur quadratischen Rauheit begründet werden kann. Insgesamt fällt auf, dass die Oberflächenrauheit von HOP-Graphit relativ gering ist. Die Ähnlichkeit von Linienrauheit und Flächenrauheit sprechen bei dieser Oberfläche für eine gute Messung und eine glatte Graphitoberfläche, deren Rauheit ohne thermische Schwingungen wahrscheinlich noch geringer wäre. Gitterdefekte hatten dabei geringen Einfluss auf die Messung.

#### 4.1.2 Gitterstruktur und Elektronendichteverteilung

In diesem Abschnitt soll die Elektronendichteverteilung und die Gitterstruktur des Graphit untersucht werden. Dafür wurde ein kleiner Bereich herangezoomt, damit die atomare Struktur sichtbar wird. Es wurde ein Bereich von  $3 \times 3$  nm verwendet, der möglichst glatt erscheint. Die Verkipfung der Probe wurde korrigiert, die Aufnahme ist in Abbildung 9 zu sehen.



(a) Oberfläche der Graphitprobe bei atomarer Auflösung. Es lässt sich die hexagonale atomstruktur erkennen.



(b) Beispielhafter topologischer Verlauf, entlang der x-Achse

Abbildung 9: Aufnahme der Oberflächen von Graphit in einem Bereich von 3 x 3 nm. Die Höhendifferenz liegt im Bereich von 1.5 Å

Um die Gitterstruktur noch besser sehen zu können, wird die Oberfläche im Constant Height Mode gescannt. Dafür werden der  $P_{gain}$  und der  $I_{gain}$  auf die Werte in Tabelle 3 gesetzt.

Tabelle 3: Parameter zur Topographiemessung (CC-Mode)

Variable	Wert
Set point	1 nA
P-gain	0
I-gain	4
Tip-voltage	50 mV

Für den Scan wurde eine Fläche von 1,1 x 1,1 nm gewählt. Die Aufnahme, mit eingezeichneter hexagonaler Struktur ist in Abbildung 10 zu sehen. Die Aufnahme wurde geschert, damit die Gitterstruktur besser zu erkennen ist.

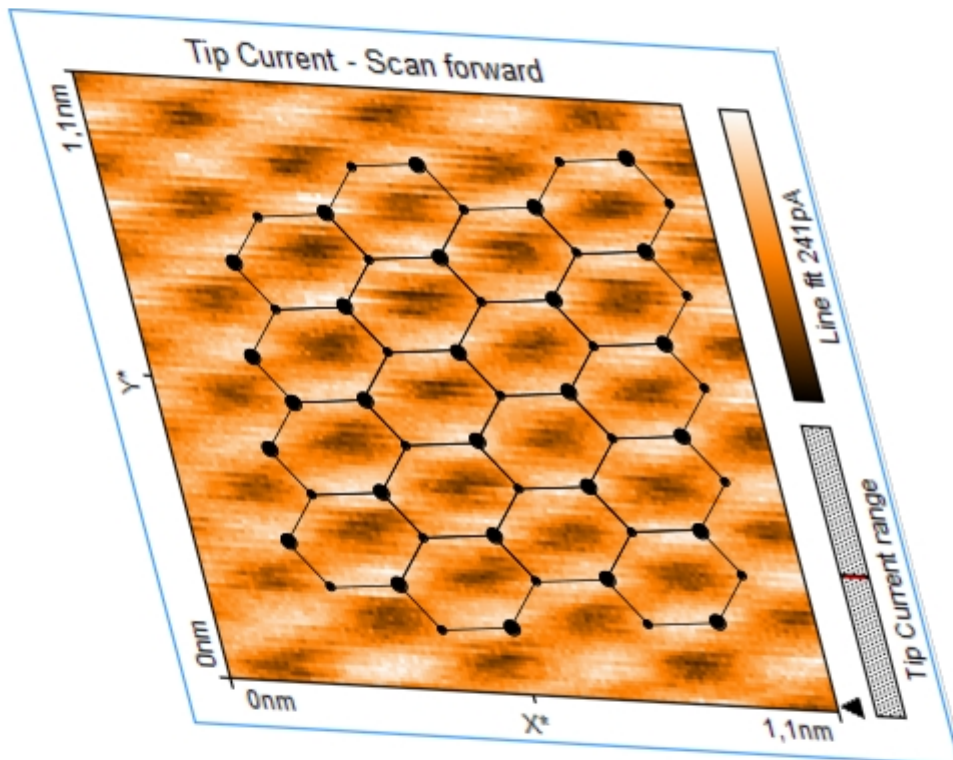


Abbildung 10: Aufnahme der Oberfläche im Bereich von 1,1nm x 1,1nm. Zur Veranschaulichung wurde die Gitterstruktur eingezeichnet.

Abbildung 10 ist so zu interpretieren, dass an den hellen Stellen die Gitteratome ohne Verbindungen zur darunterliegenden Schicht liegen, daher liegen die Elektronen direkt am Atom an und es wird ein höherer Tunnelstrom gemessen. An den orangen Stellen befinden sich die Atome mit einer Verbindung zur darunterliegenden Schicht, wodurch der Tunnelstrom geringer wird. Die schwarzen Bereiche entsprechen der Mitte der Hexagons, bei welchen das nächste Atom erst in der darunterliegenden Schicht liegt, sodass der Tunnelstrom sehr gering ist. In Abbildung 11 ist eine dreidimensionale Ansicht der Oberfläche zu sehen.

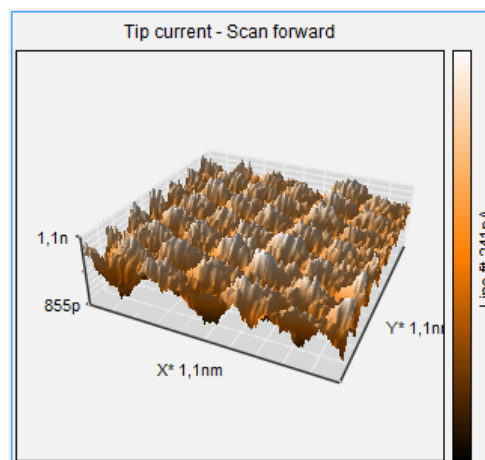


Abbildung 11: 3D Aufnahme der Oberfläche im Bereich von 1 x 1 nm.



### 4.1.3 Mittlerer Atomabstand

Der mittlere Atomabstand wird aus den Messdaten mithilfe eines Bildbearbeitungsprogramms bestimmt. Die Abbildung ist durch die Messung verzerrt, da die Piezoelemente nicht in allen Richtungen die gleiche Kalibrierung haben. Man erkennt dies insbesondere an den Winkeln zwischen den eingezeichneten Linien, welche nicht wie erwartet durch die sp<sup>2</sup>-Hybridorbitale von [HOP]-Graphit und der dadurch resultierenden Hexagonalstruktur 60° betragen. Die Winkel zwischen den eingezeichneten Linien betragen  $\alpha = \sphericalangle(B, C) = 59.99(1)^\circ$ ,  $\beta = \sphericalangle(A, C) = 72.33(1)^\circ$  und  $\gamma = \sphericalangle(A, B) = 47.68(1)^\circ$ . Insgesamt kann dadurch eine Abweichung vom wirklichen Atomabstand entstanden sein.

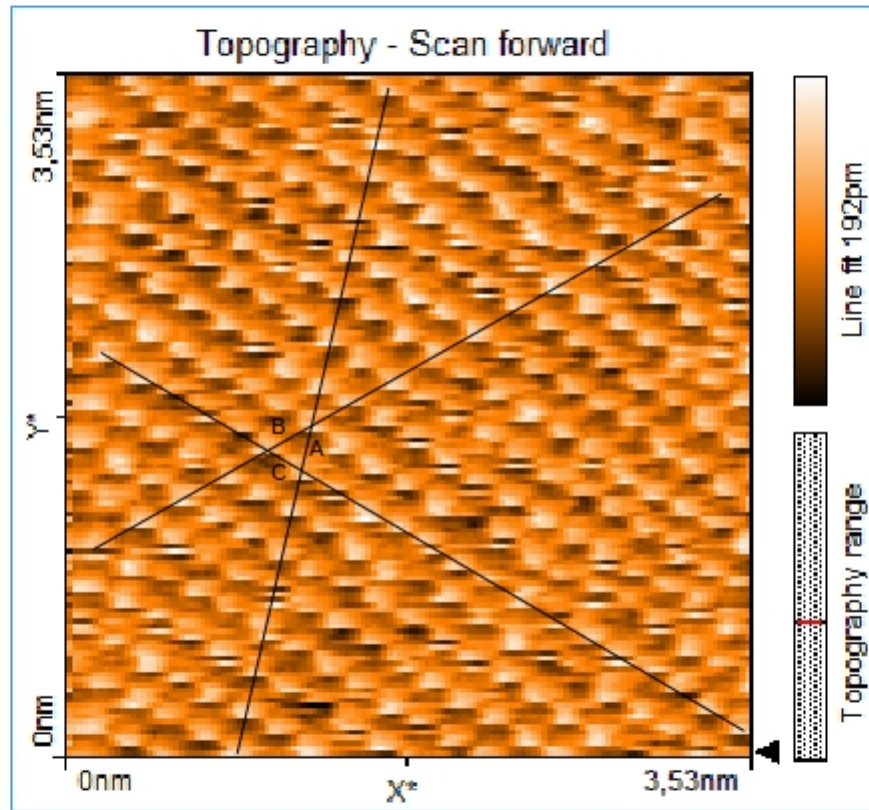


Abbildung 12: Bestimmung des mittleren Atomabstandes

Um den Atomabstand aus Abbildung 12 zu bestimmen, werden die Längen von Linien parallel zu den eingezeichneten Linien gemessen und durch die Anzahl der Verbindungen von hellen Stellen geteilt. In Tabelle 4 sind die Messwerte für alle drei Richtungen eingetragen.

Tabelle 4: Atomabstände der Graphitprobe. Der Fehler auf die Länge der Linien beträgt an jedem Ende ein Drittel der Atomgröße, sodass der Gesamtfehler auf die Länge der Linie zwei Drittel der Atomgröße  $\cong 73.8 \text{ pm}$  beträgt. In der Tabelle ist die Länge der Linie, die Anzahl der Atomabstände und der daraus resultierende Atomabstand mit Fehler auf der letzten Stelle eingetragen.

Parallel zu	Gesamtlänge L/nm	n	Atomabstand a/pm
A	3,53	16	221(5)
	3,29	15	220(5)
	3,49	16	218(5)
	3,33	15	222(5)
B	3,73	15	249(5)
	3,75	15	250(5)
	4,00	16	250(5)
	3,71	15	248(5)
C	3,86	20	193(4)
	4,00	21	190(4)
	3,89	20	195(4)
	3,86	20	193(4)

Der Mittelwert der Atomabstände 'A' beträgt  $\overline{a_A} = 220 \text{ pm}$ , mit einem Gaußfehler von 2.5 pm und einem statistischen Fehler von 0.9 pm. Der Mittelwert der Atomabstände 'B' beträgt  $\overline{a_B} = 249 \text{ pm}$ , mit einem Gaußfehler von 2.5 pm und einem statistischen Fehler von 0.6 pm. Der Mittelwert der Atomabstände 'C' beträgt  $\overline{a_C} = 193 \text{ pm}$ , mit einem Gaußfehler von 2 pm und einem statistischen Fehler von 1 pm. Man sieht, dass der statistische Fehler unterdem Gaußfehler liegt, sodass die Atommitte anscheinend besser abgeschätzt werden konnte als vermutet. Die Abweichung vom Literaturwert von 246 pm ist bei allen Mittelwerten verschieden groß. Insgesamt ergibt sich aus dem arithmetischen Mittel über alle Werte ein Atomabstand von  $\bar{a} = 221(1) \text{ pm}$ , welcher vom Literaturwert um 10 % nach unten abweicht. Wahrscheinlich ist diese Abweichung zum Großteil durch die Einstellung der Piezoelemente entstanden. Der Atomabstand  $d_{Atom}$  zum nächsten Nachbaratom kann aus dem Cosinussatz gewonnen werden.

$$a^2 = 2d_{Atom}^2(1 - \cos(120^\circ)) \quad (8)$$

$$d_{Atom} = \frac{a}{\sqrt{3}} \quad (9)$$

Es ergibt sich ein mittlerer Atomabstand von  $d_{Atom} = 127.4(8) \text{ pm}$ , welcher vom Literaturwert 142 pm nach wie vor um ca. 10% nach unten abweicht. Da die Abstände in verschiedenen Richtungen wie bereits erwähnt systematisch voneinander abweichen, wäre es möglich Korrekturen mittels einer Scherung und Streckung im  $\mathbb{R}^2 = \langle \mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2 \rangle$  durch die Matrix

$$M_{scher, streck} = \begin{pmatrix} 1 & a/b \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & a \\ 0 & b \end{pmatrix} \quad (10)$$



mit dem Scherfaktor  $a/b$  (in Richtung  $\mathbf{e}_1$ ) und dem Streckfaktor  $b$  (in Richtung  $\mathbf{e}_2$ ) in Abbildung 12 herbeizuführen. Falls man nun die Längenmaße mittransformiert, wird sich an den Messwerten nichts ändern. Deshalb kann eine Korrektur ausschließlich durch die Benutzung der alten Längenmaße für das gescherstreckte Bild herbeigeführt werden. Allerdings müsste man sich für eine Richtung  $\mathbf{e}_1$  entscheiden, deren Länge bei der Scherstreckung konstant bleibt. Die 'Atomabstände' in dieser Richtung erzeugen damit den neuen mittleren Atomabstand, sodass je nachdem, wie man  $\mathbf{e}_1$  wählt, das gewünschte Ergebnis für den mittleren Atomabstand erzielt werden kann. Da die Richtung von  $\mathbf{e}_1$  nur geraten werden kann, kann der Fehler durch die Verzerrung aus den Messwerten nicht zurückverfolgt werden. Der Fehler bleibt also als systematischer Fehler bestehen, wobei man die Messdaten durch geeignete Wahl von  $\mathbf{e}_1$  perfekt manipulieren könnte, da sowohl Werte unter dem Literaturwert, als auch Werte über dem Literaturwert gemessen wurden. Damit kann die Abweichung von 10 % zum Großteil durch systematische Fehler erklärt werden.

#### 4.1.4 Diskussion

Das [HOP]-Graphit wurde in diesem Versuchsteil im CC-Modus, als auch im CH-Modus untersucht. Zuerst wurde ein Bereich von 600nm x 600nm abgerastert, sodass die grobe Struktur der untersuchten Oberfläche erkennbar ist. Um die Rauheit der Oberfläche zu bestimmen wurde ein kleinerer möglichst glatter Bereich von 122nm x 122nm im CC-Modus abgerastert. Es konnte eine Linienrauheit von  $R_a = 7.0159$  pm und  $R_q = 9.1550$  pm und eine Flächenrauheit von  $S_a = 10.471$  pm und  $S_q = 13.100$  pm bestimmt werden. Man sieht, dass die quadratische Rauheit größer ist, als die arithmetische. Prozentual ergeben sich die Werte  $\frac{R_a}{R_q} = 0,78 = 78\%$  und  $\frac{S_a}{S_q} = 0,80 = 80\%$ . Dieses Rauschen könnte durch Oberflächenschwingungen entstanden sein, wobei die Messung der Linienrauheit konsistent mit der Messung der Flächenrauheit ist, welche insgesamt aber etwas größer ist, da die gewählte Fläche im Vergleich zur Linie eine größere Wölbung besitzt. Um die Gitterstruktur sichtbar zu machen, wurde ein kleinerer Bereich von etwa 3nm x 3nm abgerastert, sodass die hexagonale Gitterstruktur mit geübtem Auge identifiziert werden kann. Danach wurde ein möglichst glatter Ausschnitt mit einer Fläche von 1,1nm x 1,1nm ausgewählt, welcher im CH-Modus abgerastert werden sollte, sodass die Gitterstruktur, aufgrund der exponentiellen Abhängigkeit, gut erkennbar ist. Nach einer Scherung konnte die hexagonale Gitterstruktur gut erkennbar eingezeichnet werden. Die Daten sind geschert, da die Piezoelemente nicht in allen Richtungen die gleiche Kalibrierung haben. Zuletzt sollte aus einer CC-Mode-Messung der mittlere Atomabstand bestimmt werden. Dafür wurde eine Messung mit einer Fläche von 3,53nm x 3,53nm verwendet, wobei auch die 3nm x 3nm Messung hätte verwendet werden können. Mit einem Bildbearbeitungsprogramm konnte der Atomabstand der Atome mit der höchsten Elektronendichte bestimmt werden. Auffällig war, dass, abhängig von der Richtung, stark variierende Atomabstände gemessen wurden. Die Winkel zwischen den gemessenen Richtungen weichen mit  $\alpha = \angle(B, C) = 59.99(1)^\circ$ ,  $\beta = \angle(A, C) = 72.33(1)^\circ$  und  $\gamma = \angle(A, B) = 47.68(1)^\circ$  in Abbildung 12 ebenfalls von den durch die sp<sup>2</sup>-Hybridisierung erwarteten 60° ab. Im Mittel betrugen die Atomabstände in den drei gemessenen Richtungen

A,B und C  $\overline{a_A} = 220 \text{ pm}$ ,  $\overline{a_B} = 249 \text{ pm}$  und  $\overline{a_C} = 193 \text{ pm}$  wodurch sich ein Mittelwert von  $\overline{a} = 221(1) \text{ pm}$  ergab. Dieser weicht vom Literaturwert von  $246 \text{ pm}$  um ca. 10% nach unten ab. Mit dem Cosinussatz konnte daraus der Atomabstand zum nächsten Nachbaratom von  $d_{Atom} = 127.4(8) \text{ pm}$  bestimmt werden, welcher vom Literaturwert  $142 \text{ pm}$  ebenfalls um 10% nach unten abweicht. Den größten Einfluss auf die Messung hatte der systematische Fehler, welcher durch die Kalibrierung der Piezoelemente entstanden ist. Dieser könnte bei genauerer Kenntnis des RTM exakt rausgerechnet werden. Dazu Fehlen aber Informationen zur Kalibrierung der Piezoelemente, sodass der systematische Fehler aus den Messdaten nicht rausgerechnet werden kann, ohne das Ergebnis vorauszusetzen.

## 4.2 (111)-Goldschicht

Die Rauheit der Goldschicht sollte mit dem RTM bestimmt werden. Dazu wurde die Oberfläche der Goldschicht mit dem RTM im CC-Mode abgerastert. Wegen der Kornstruktur wurden für die Bestimmung der Flächenrauheit zwei Messungen vorgenommen, sodass Korngrenzen nur in der ersten Messung in die Berechnung der Rauheit eingingen. Die (111)-Goldschicht musste aufgrund von Kratzern auf der Oberfläche mehrfach gedreht werden. Während der Justierung ist die Pt-Ir-Spitze des RTM mit der Oberfläche der Goldschicht kollidiert, sodass eine zweite Pt-Ir-Spitze angefertigt werden musste. Diese konnte ebenfalls nach wenigen Versuchen aus bereits benutzten Pt-Ir-Spitzen angefertigt werden. Zu erste wird eine Aufnahme mit maximalem Scanbereich gemacht, dabei wird die tip-Voltage von  $50 \text{ mV}$  auf  $500 \text{ mV}$  erhöht, um ein schärferes Bild zu erhalten. In Abbildung 13 ist die Aufnahme mit maximalem Scanbereich zu sehen.

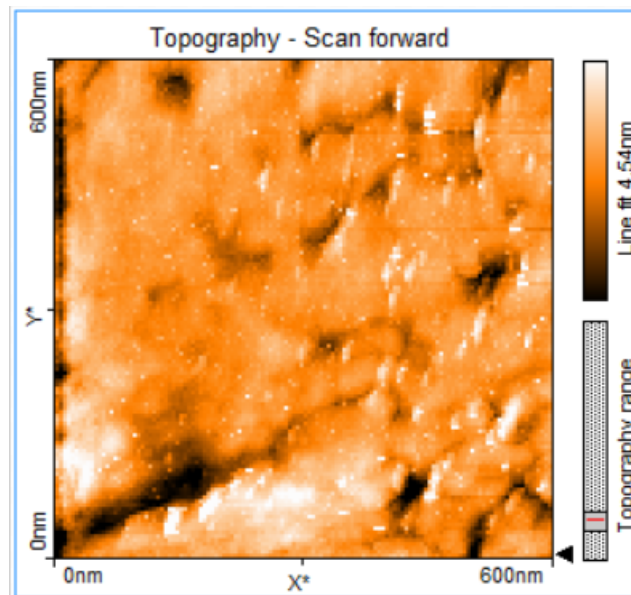


Abbildung 13: Aufnahme der Gold(111)-Schicht mit einer tip-Voltage von  $500 \text{ mV}$ . Im rechten Bereich der Abbildung ist die Kornstruktur der Probe gut zu erkennen.

In Abbildung 13 ist vor allem im rechten Bereich die Kornstruktur des Goldes zu sehen. Für die Aufnahme wurden die Verkippungen bereits korrigiert.

### 4.2.1 Rauheit

Für die Untersuchung der Oberflächen- und Linien Rauheit wurde ein Bereich von 202nm x 202nm ausgewählt. Da ein möglichst glatter Bereich gewählt werden sollte, wurde der obere linke Bereich aus Abbildung 13 ausgewählt. In Abbildung 14 ist eine Aufnahme des Bereichs zu sehen.

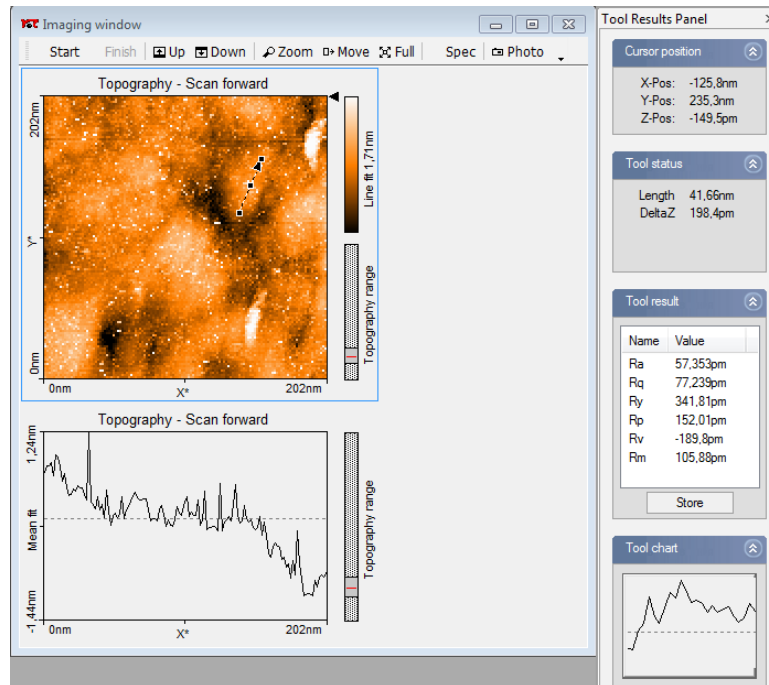
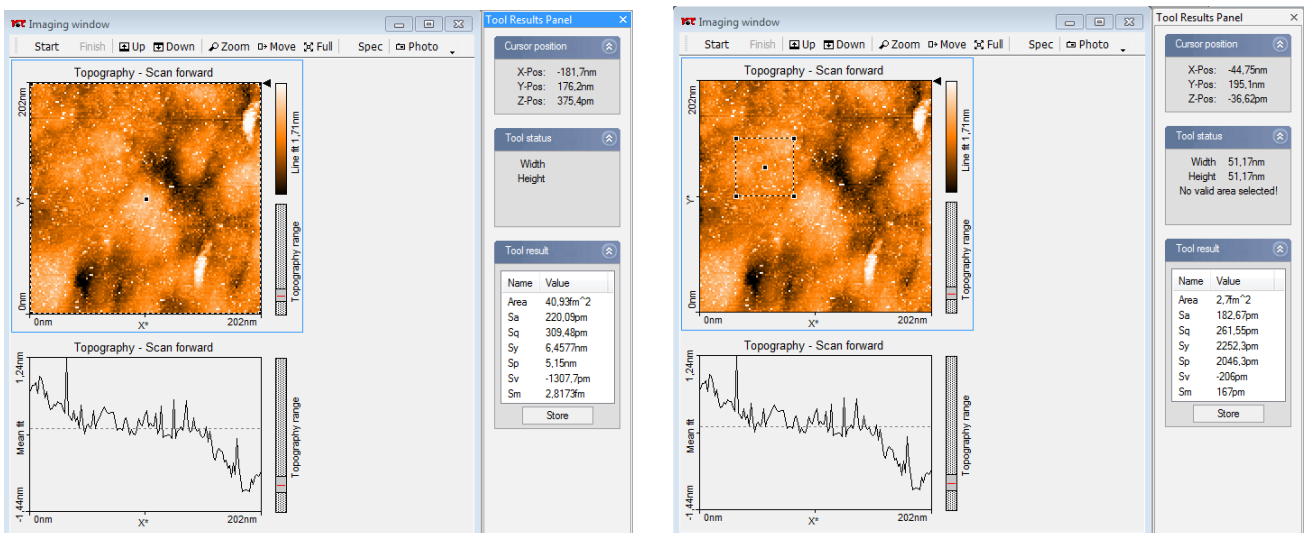


Abbildung 14: Mittlere Linienrauheit der (111)-Goldschicht ( $R_a = 57.353 \text{ pm}$  und  $R_q = 77.239 \text{ pm}$ )



(a) Mittelung über die gesamte Fläche, da durch die Kornstruktur keine große glatte Fläche zu finden war. ( $S_a = 220.09 \text{ pm}$  und  $S_q = 309.48 \text{ pm}$ )

(b) Mittelung eine kleinere möglichst glatte Fläche. Die Verkippung wurde bei allen Messungen korrigiert. ( $S_a = 182.67 \text{ pm}$  und  $S_q = 261.55 \text{ pm}$ )

Abbildung 15: Mittlere Flächenrauheit der (111)-Goldschicht

Die Oberflächenrauheit wird für die gesamte Oberfläche und für die glatte Oberfläche oben

links bestimmt (vgl. Abbildung 15b, Oberfläche = 2700 nm<sup>2</sup>). Bei der Bestimmung der Oberflächenrauheit, wurden die Werte in Tabelle 5 ermittelt. Dafür wurde die Funktion von easyScan2 verwendet.

Tabelle 5: Flächenrauheit der Goldprobe für die gesamter Flächen und die Ausschnitt in Abbildung 15b

Lokalisation	$S_a$	$S_q$
Gesamter Bereich	220,09pm	309,48pm
Bereich von Abbildung 15b	182,67pm	261,55pm

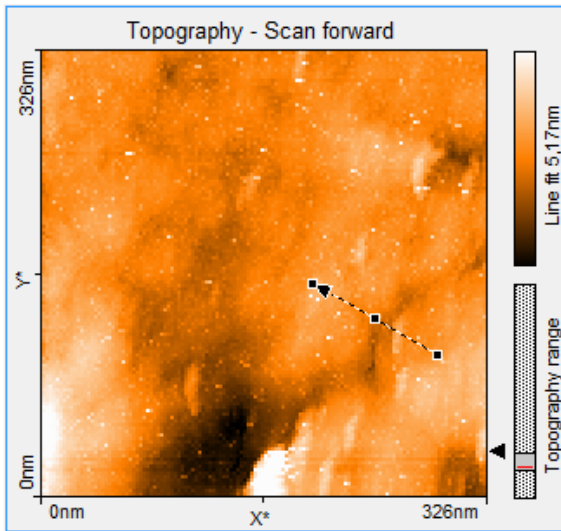
Die bestimmten Werte zeigen das an der glatten Stelle die Oberflächenrauheit mit  $S_a$  182,67pm um 20% geringer als auf der gesamten Fläche ist. Die Oberflächenrauheit auf der gesamten Flächen beträgt  $S_a = 220,09\text{pm}$ . Die Aufnahme der Linienrauheit ist in Abbildung 14 zu sehen. Es wurde eine Linienrauheit von  $R_a = 57,353\text{pm}$  bestimmt, die quadratische Linienrauheit liegt bei  $R_q = 77,239\text{pm}$ . Die bestimmte Flächenrauheit ist ca. 3 mal größer als die bestimmte Linienrauheit. Dieses Resultat deutet auf die unregelmäßige Kornstruktur von Gold hin, welche die Flächenrauheit einer Fläche von ca. 2700 nm<sup>2</sup> beeinflusst.

#### 4.2.2 Monoatomare Stufen und Gitterdefekte

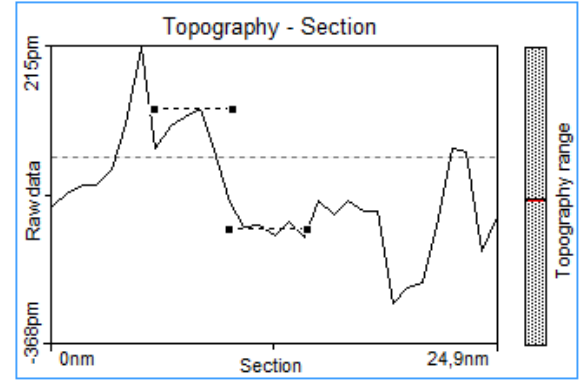
In diesem Abschnitt soll die atomare Struktur der Goldprobe untersucht werden. Da Gold eine homogene Elektronendichteverteilung hat, kann man die Struktur nicht wie beim Graphit bestimmen. Für die Bestimmung dieser, werden monoatomare Stufen gesucht. Diese Stufen entsprechen dem Netzebenenabstand der Gold(111)-Probe. Da Gold eine fcc-Struktur besitzt, kann mit Gleichung 11 und einer Gitterkonstante von  $a=4.08 \text{ \AA}$  der atomare Abstand bestimmt werden.

$$d_{111} = \frac{a}{\sqrt{3}} = 236\text{pm} \quad (11)$$

Beispielhaft ist eine Stufe in Abbildung 16 zu sehen. Alle weiteren Aufnahmen sind im Anhang zu finden.



(a) Abschnitt, auf dem die Stufe aufgenommen wurde



(b) Topographischer Verlauf entlang des gewählten Weges. Die Höhe der Stufe beträgt 238(12) pm

Abbildung 16: Beispielhafte Darstellung einer mono atomaren Stufe

Um ein gutes Ergebnis zu erhalten, wurden mehrere Messungen gemacht. Da nicht genügend einatomige Stufen vorhanden waren, wurden Stufen höherer Ordnungen hinzugenommen. Dabei wurde die Ordnung der Stufe jeweils geschätzt. Die Fehler wurden je nach Rauschen mit 5% bis 10% abgeschätzt. Die gemessenen Werte sind in Tabelle 6 zu sehen.

Tabelle 6: Gemessene Stufen für die Bestimmung des Netzebenenabstandes der Goldprobe. Die Fehler wurden dabei mit 5% bis 10% abgeschätzt. n gibt die Ordnung der Stufe an, diese wurden jeweils geschätzt

Stufenhöhe/pm	n	Netzebeneabstand/pm
236(12)	1	236(12)
236(12)	1	236(12)
243(12)	1	243(12)
234(12)	1	234(12)
238(12)	1	238(12)
959(48)	4	239(12)
714(36)	3	238(12)
935(47)	4	234(12)

Aus den Messdaten ergibt sich ein Mittelwert von  $\bar{d}=237(4)$ pm dieser Weicht relativ um 0,42% vom Erwartungswert 236pm ab. Das Ergebnis entspricht einer guten Messung. Es sei jedoch gesagt, dass speziell nach “guten” Kanten gesucht wurde, wodurch nicht sichergestellt ist, dass der bestimmte Wert die Gesamtheit der Kanten repräsentiert. Durch das aussuchen der Kanten wurde jedoch verhindert, dass Kanten, die von Gitterschäden kommen ausgewertet wurden. In Abbildung 17 ist auf der rechten Seite eventuell ein Gitterdefekt zu sehen.

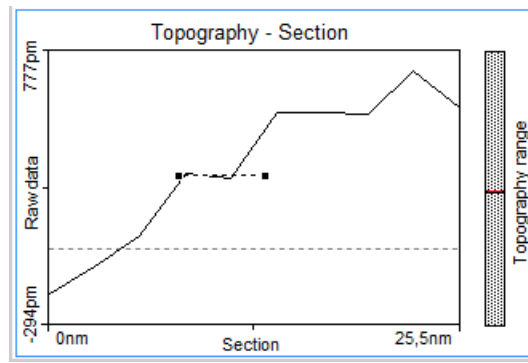


Abbildung 17: Der Peak an der rechten Seite könnte ein Gitterdefekt sein, seine Höhe entspricht ca. dem halbem Netzebenenabstand von Gold.

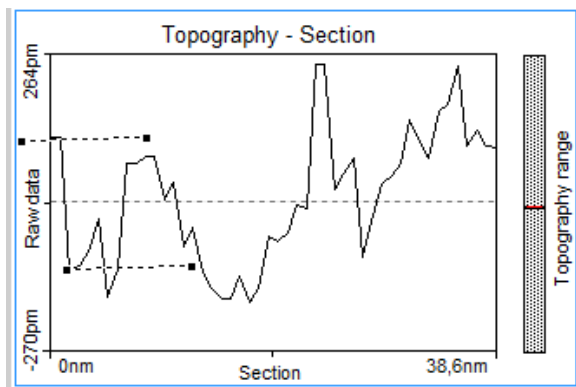
### 4.2.3 Diskussion

In diesem Abschnitt wurde eine Gold(111)-Probe untersucht. Bei der Bestimmung der Oberflächen- und Linienrauheit wurde für eine Fläche von  $202\text{nm} \times 202\text{nm}$  untersucht. Die Oberflächenrauheit wurde mit  $S_a = 220.09\text{pm}$  und die quadratische Oberflächenrauheit mit  $S_q = 309.48\text{pm}$  bestimmt. Da die Flächenrauheit stark durch die Kornstruktur von Gold beeinflusst wurde, wurde die Oberflächenrauheit für eine möglichst glatte Fläche von ca.  $2700\text{nm}^2$  erneut bestimmt. Es ergaben sich Werten von  $S_a = 182.67\text{pm}$  und  $S_q = 261.55\text{pm}$ . Die Linienrauheit  $R_a$  wurde mit  $57,353\text{pm}$  bestimmt. Für die quadratische Linienrauheit  $R_q$  ergab sich ein Wert von  $77,239\text{pm}$ . Die Werte sind ca. 3 mal kleiner als die Oberflächenrauheit. Der Netzebenenabstand für Gold wurde mit  $237(4)\text{pm}$  bestimmt und weicht relativ um  $0,42\%$  vom Literaturwert ab.

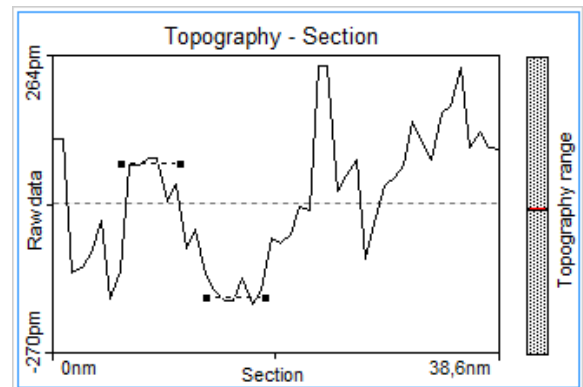
## 5 Fazit

In diesem Versuch wurden [HOP]-Graphit und eine Gold-(111)-Schicht mit einem Rastertunnelmikroskop untersucht. Es wurden die Oberflächen- und Linienrauheit, sowie die Gitterstruktur der Proben untersucht. Zuerst wurde die Graphitprobe untersucht. Die Oberflächenrauheit  $S_a$  wurde mit  $10,471\text{pm}$  bestimmt, die Linienrauheit  $R_a$  wurde mit  $7,016\text{pm}$  bestimmt. Bei der Untersuchung der Gitterstruktur konnte die Hexagonalstruktur deutlich gezeigt werden (vgl. Abbildung 10). Die Gitterkonstante wurde mit  $\bar{a} = 221(1)\text{pm}$  bestimmt, was einer relativen Abweichung von  $10\%$  entspricht. Die Abweichung konnte zum Großteil mit systematischen Fehlern erklärt werden. Bei der Untersuchung der Goldprobe wurde die Oberflächenrauheit  $S_a$  für einen Bereich von  $202 \times 202\text{nm}$  mit  $220,09\text{pm}$  bestimmt. Die Linienrauheit wurde mit  $57,353\text{pm}$  bestimmt. Der Netzebenenabstand der Gold(111)-Probe wurde mit  $237(4)\text{nm}$  bestimmt. Dies entspricht einer relativen Abweichung von  $0,42\%$ . Daneben waren viele Gitterdefekte, welche nicht Vielfache des Gitterabstandes von Gold waren, zu sehen. Insgesamt ergeben sich aus den Messungen akzeptable Resultate.

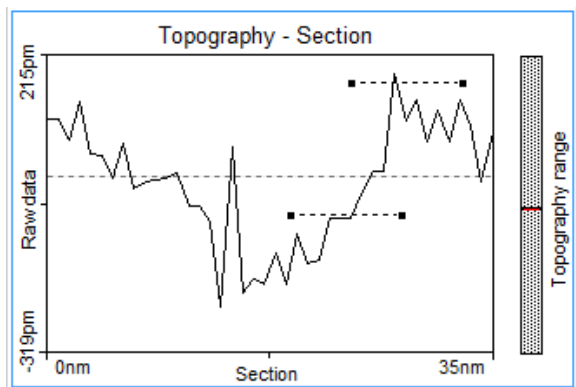
## 6 Anhang



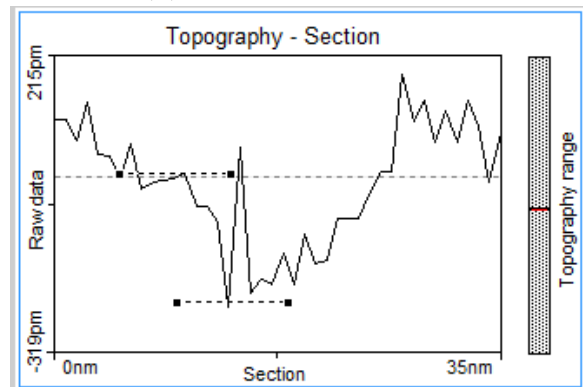
(a) Stufenhöhe  $236 \pm 12$



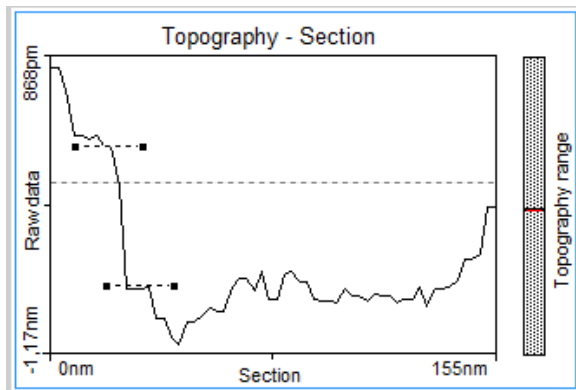
(b) Stufenhöhe  $236 \pm 12$



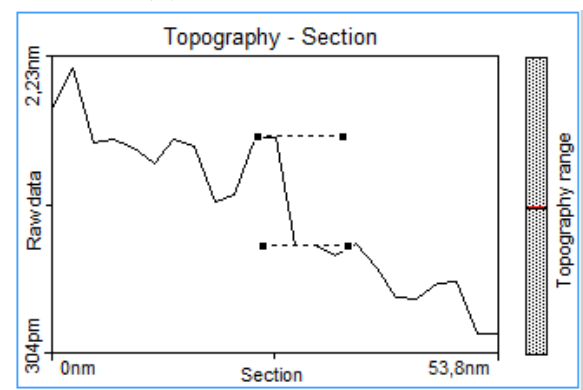
(c) Stufenhöhe  $243 \pm 12$



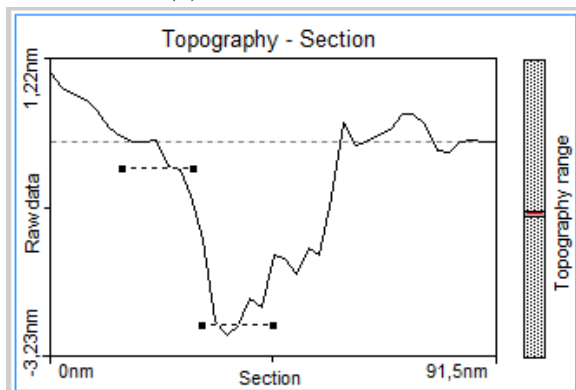
(d) Stufenhöhe  $234 \pm 12$



(e) Stufenhöhe  $959 \pm 48$



(f) Stufenhöhe  $714 \pm 36$



(g) Stufenhöhe  $935 \pm 47$

Abbildung 18: Bestimmte Stufen der Goldprobe

# Literatur

- [1] W. P. Davey. »Precision Measurements of the Lattice Constants of Twelve Common Metals«. In: *Phys. Rev.* 25 (6 1925), S. 753–761. DOI: 10.1103/PhysRev.25.753. URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.25.753>.
- [2] H. R. Gerd Binnig. *SCANNING TUNNELING MICROSCOPY - FROM BIRTH TO ADOLESCENCE*. 8. Dez. 1986. URL: [https://moodle2.uni-wuppertal.de/pluginfile.php/223710/mod\\_resource/content/1/STM.pdf](https://moodle2.uni-wuppertal.de/pluginfile.php/223710/mod_resource/content/1/STM.pdf) (besucht am 23.09.2015).
- [3] *Graphit*. URL: <https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/5/54/GraphitGitter4.png> (besucht am 23.09.2015).
- [4] *Graphit*. URL: <https://de.wikipedia.org/wiki/Graphit> (besucht am 23.09.2015).
- [5] *Iridium*. URL: <https://de.wikipedia.org/wiki/Iridium> (besucht am 24.09.2015).
- [6] *Tunneleffekt*. URL: <https://de.wikipedia.org/wiki/Tunneleffekt> (besucht am 23.09.2015).
- [7] *Tunneleffekt - Wellenfunktion und Potential (1)*. URL: <http://www.semibyte.de/wp/graphicslibrary/gl-physics/tunneleffekt> (besucht am 23.09.2015).