



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			

29. September 2015

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	2
2	Theorie	2
2.1	Tunneleffekt	2
2.2	Oberflächenrauheit	3
2.3	Struktur der Proben	4
2.3.1	Graphit	4
2.3.2	Gold	5
3	Versuchsaufbau	5
3.1	Betriebsmodi	7
3.1.1	Constant Current Mode	7
3.1.2	Constant Hight Mode	8
4	Versuchsdurchführung und Auswertung	9
4.1	Graphit	9
4.1.1	Rauheit	10
4.1.2	Gitterstruktur und Elektronendichteverteilung	11
4.1.3	Mittlerer Atomabstand	11
4.2	(111)-Goldschicht	11
4.2.1	Rauheit	12
4.2.2	Monoatomare Stufen und Gitterdefekte	14
4.3	Diskussion	14
5	Fazit	14

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 Schrödigergleichung 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 Schrödigergleichung 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 ρ_s bei der Fermienergie E_f . Die Differenz der Austrittsarbeiten der Materialien wird mit Φ 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, Graphit und eine unbekannte Probe) sind Leiter, sie unterscheiden sich jedoch in der Konfiguration der Elektronen. Es gibt einen Unterschied zwischen der Verteilung der Elektronen in Metallen und Halbleitern. Metalle werden dabei durch das Elektronen-Gas beschrieben und somit eine homogene Verteilung angenommen. Bei der Beschreibung von Halbleitern müssen noch Bandlücken berücksichtigt werden. Da die räumliche Verteilung der Elektronen nicht homogen ist, kann aus der Ladungsverteilung die Position der Atome bestimmt werden. 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 graphite), ein Halbleiter mit einer hcp-Gitterstruktur. In Abbildung 2 ist die Gitterstruktur des Graphit zu sehen. In einer Ebene werden die Kohlenstoffatome aufgrund der sp²-Hybridisierung stark durch kovalente Bindungen zusammengehalten. Zwischen den Ebenen werden die Kohlenstoffatome nur von Van-der-Waals-Kräften zusammengehalten.

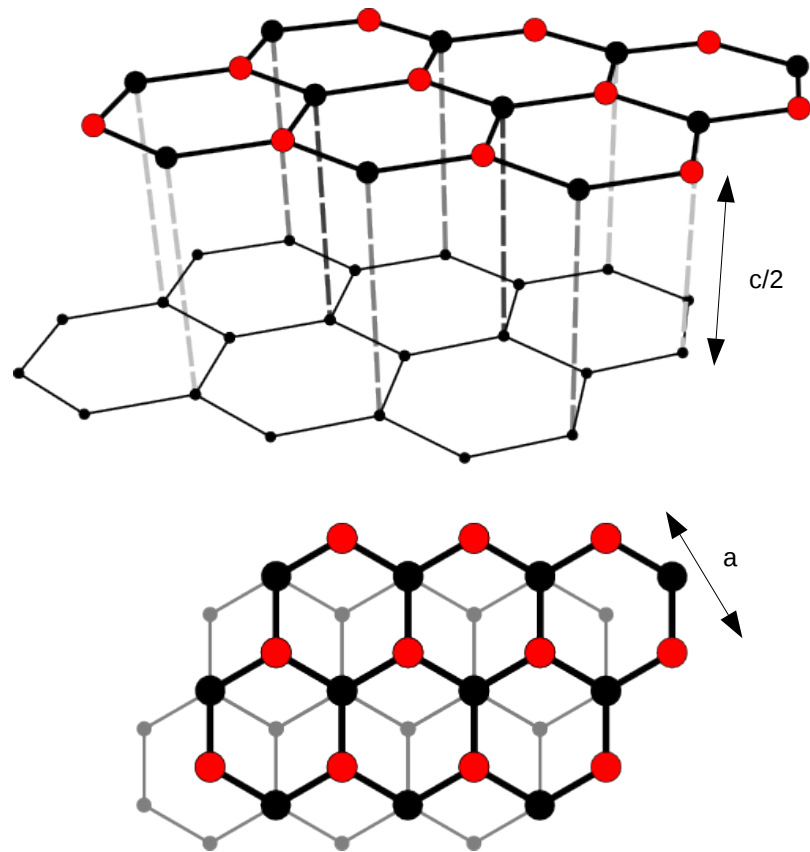


Abbildung 2: Schematische Struktur von Graphit. Die Ebenen liegen im ABAB-Form vor, sodass immer die jede zweite gleich aufliegt. Die Ebenen untereinander besitzen nur an jedem zweiten Punkt der Hexagonale eine Verbindung. Entnommen von [3], modifiziert

Die in Abbildung 2 eingezeichneten Gitterkonstanten haben die Werte $a = 2.26 \text{ \AA}$ 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 auch mit dem RTM zu sehen.

2.3.2 Gold

Gold hat eine fcc-Kristallstruktur, dabei beträgt die Gitterkonstante $a = 4.065 \text{ \AA}$ [1]. Untersucht wird die (111)-Goldschicht, dabei sind (111) die Millerindizes, die die räumliche Struktur des Kristalls beschreiben. Es ist deutlich schwerer die atomare Struktur von Gold 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, berührt diese jedoch nicht. Wird eine Spannung angelegt, so kann ein “Tunnelstrom” fließen. Bewegt man nun die Spitze parallel zur Oberfläche, so erhält über den Tunnelstroms ort aufgelöste Informationen über die Oberfläche.

Grundlegend ist das Rastertunnelmikroskop aus drei Elementen aufgebaut, einem Tastkopf, einem Piezosteurelement 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 Piezosteurelement 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. Das beschichten der Oberfläche mit einem leitendem Material ist nicht möglich, da die Oberflächenstruktur durch die Beschichtung verdeckt wird.

Ein schematischer Versuchsaufbau ist in Abbildung 3 zu sehen.

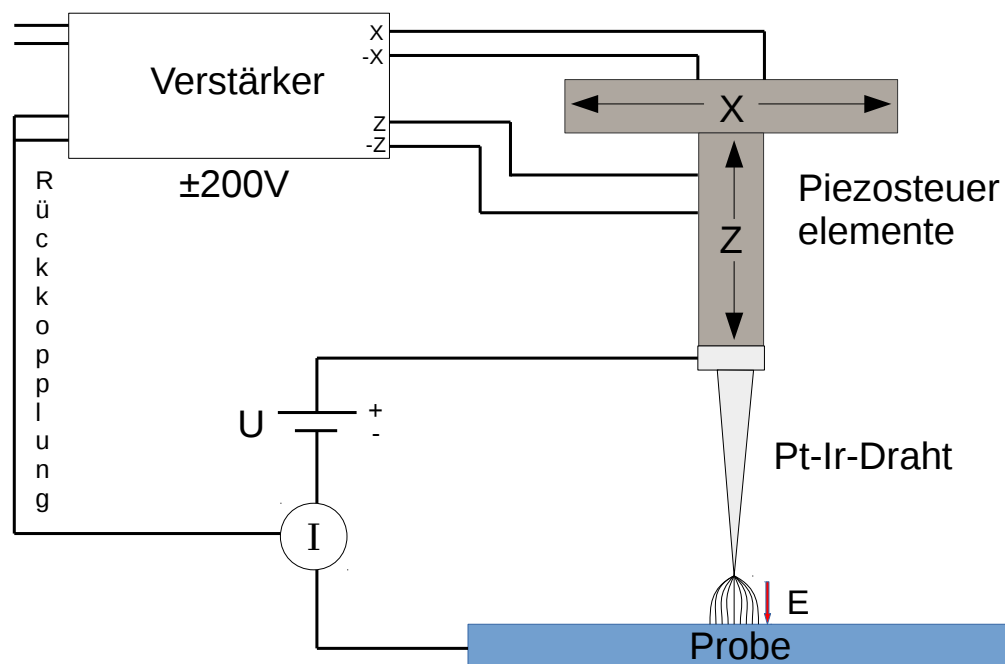


Abbildung 3: Schematische Skizze des Versuchsaufbaus. Die Positionierung der Platin-Iridium-Tastkopfes wird über die Piezoelemente im nm-Bereich gesteuert. Die Rückkopplung dient zur Steuerung der Höhe des Tastkopfes.

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 $A = \pi \cdot R_{Atom}^2$ bestimmt. Für den Radius wurde ein Wert von 1.35 \AA [5] angenommen, es ergibt sich eine Oberfläche von 5.73 \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
unnelstrom U	1nA	1nA
Feldstärke E	50kV/mm	500kV/mm
Stromdichte j	17,5kA/mm ²	17,5kA/mm ²

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 ein über ein 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. Ein schematische Skizze der Funktionsweise ist in Abbildung ?? zu sehen.

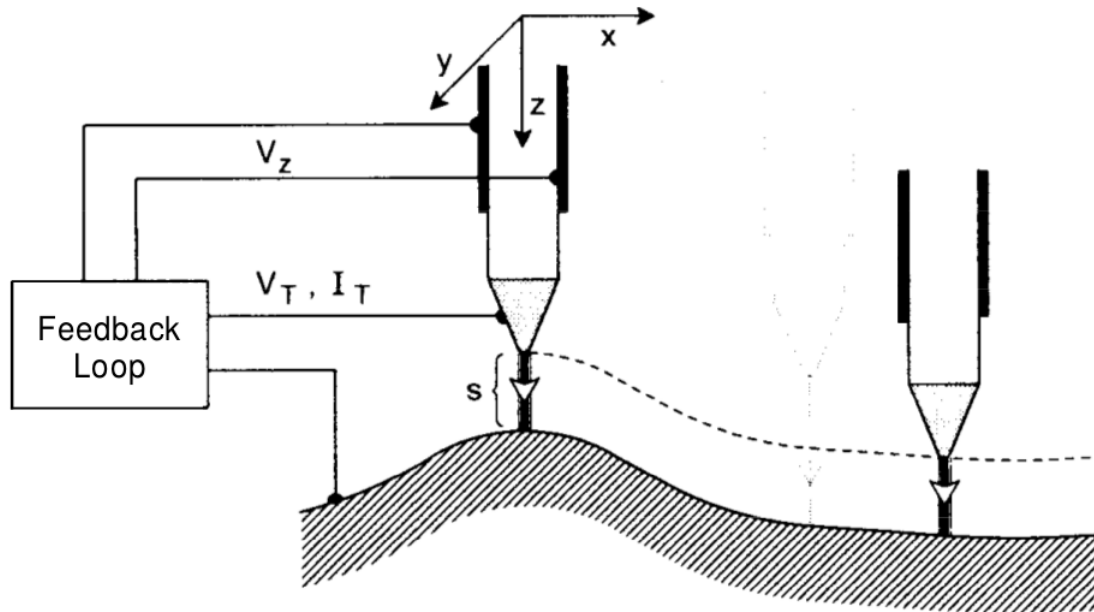


Abbildung 4: Darstellung des Constant Current Mode für das Rastertunnelmikroskop. Entnommen von [2]

3.1.2 Constant Hight Mode

Im Constant Hight Mode wird der Abstand zwischen Probe und Tastkopf einmal eingestellt und nicht mehr verändert. Bei Unebenheiten in der Oberfläche kann es jedoch zu Kollisionen kommen, wodurch der Tastkopf zerstört werden kann. Der Vorteil der Messmethode ist, dass der gemessenen Tunnelstrom proportional zur Elektronendichte bei der Fermi-Energie ist.

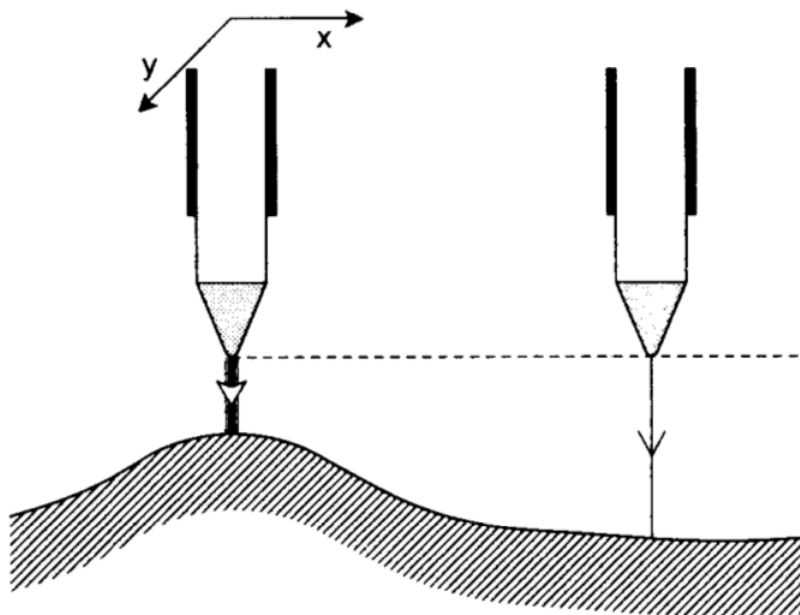


Abbildung 5: Darstellung des Constant Hight Mode für das Rastertunnelmikroskop. Entnommen von [2]

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.

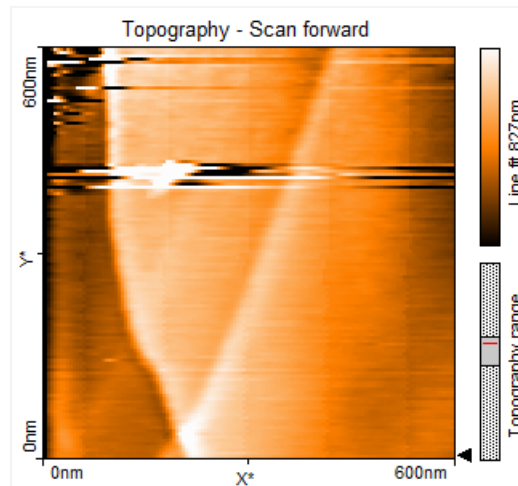


Abbildung 6: 600 nm Bild im Topographie/CC-Modus

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 Verkipfung wurde bestimmt und 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.

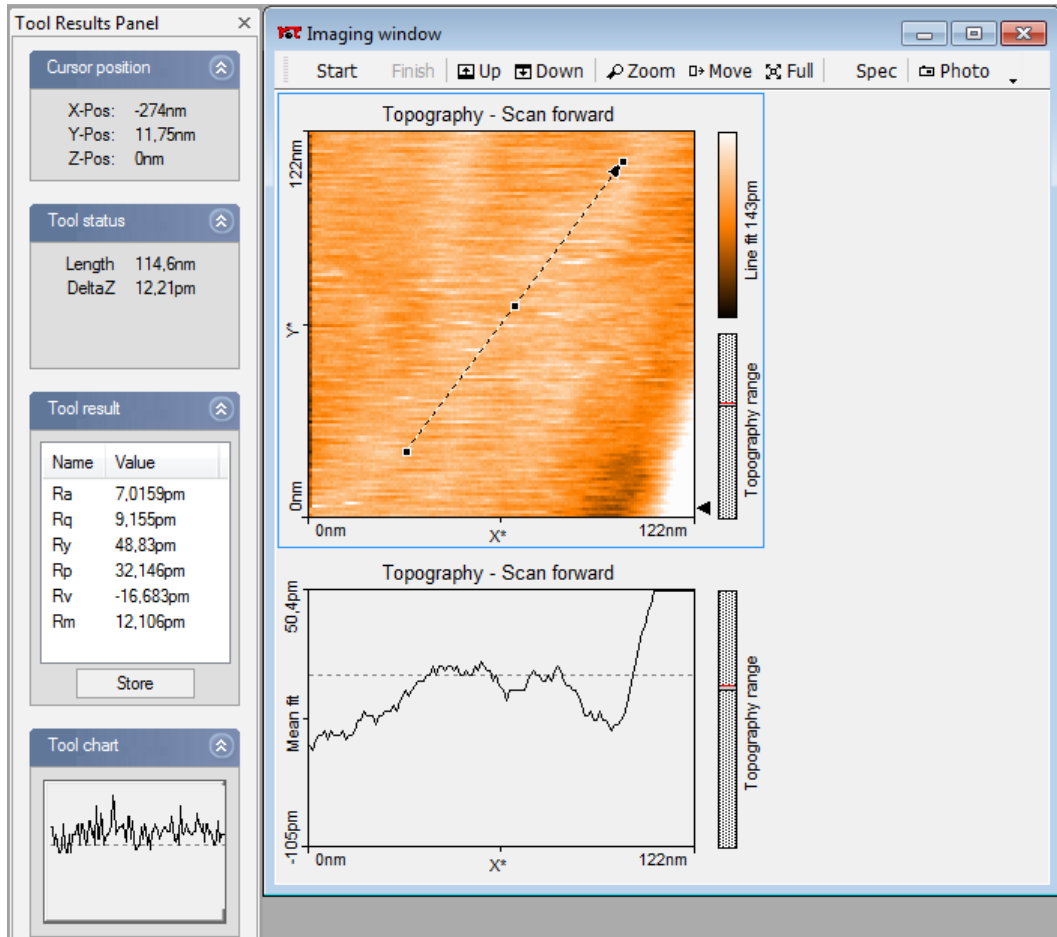


Abbildung 7: Mittlere Linienrauheit von Graphit ($R_a = 7.0159 \text{ pm}$ und $R_q = 9.155 \text{ pm}$)

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

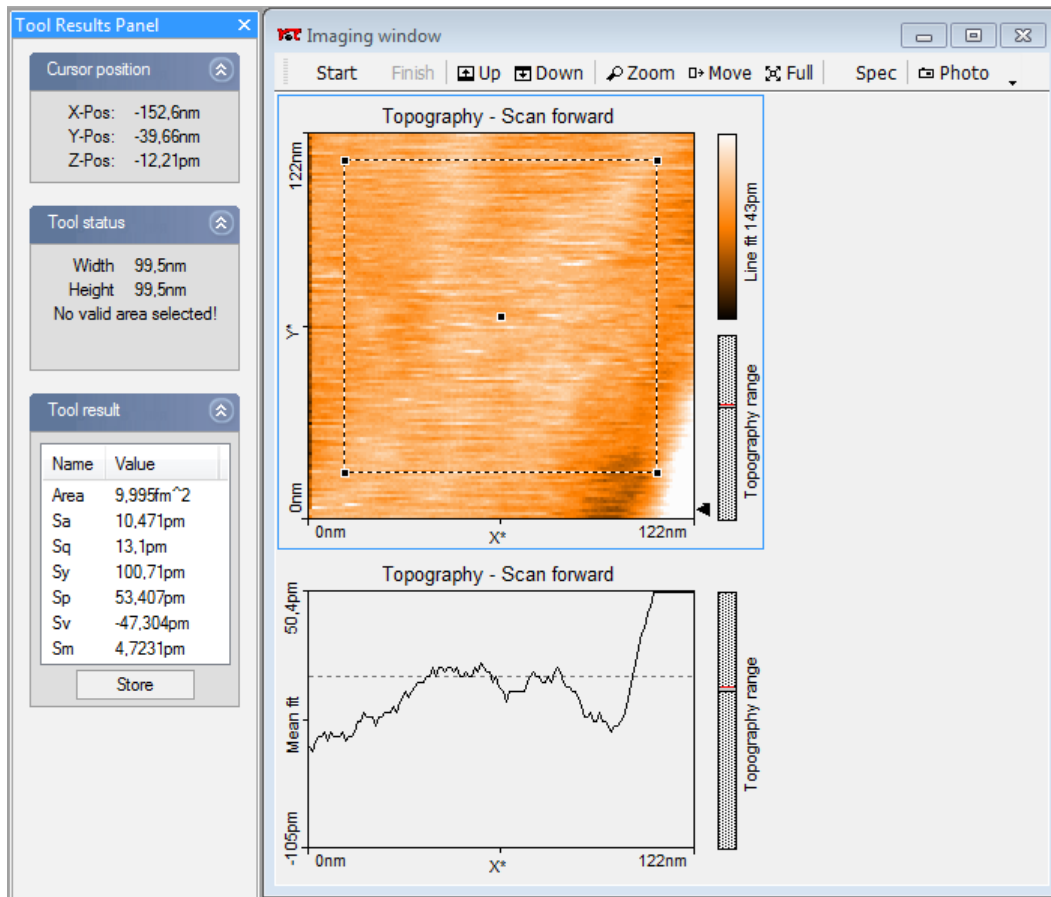


Abbildung 8: Mittlere Flächenrauheit von Graphit ($S_a = 10.471$ pm und $S_q = 13.1$ pm)

4.1.2 Gitterstruktur und Elektronendichteverteilung

4.1.3 Mittlerer Atomabstand

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 50mV auf 500mV erhöht, um ein schärferes Bild zu erhalten. In Abbildung 9 ist die Aufnahme mit maximalem Scanbereich zu sehen.

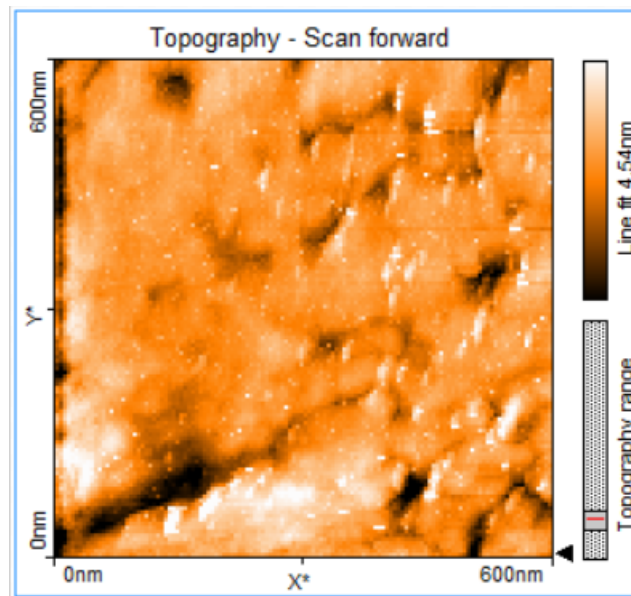


Abbildung 9: Aufnahme der Gold(111)-Schicht mit einer tip-Voltage von 500mV. Im rechten Bereich der Abbildung ist die Kronstruktur der Probe gut zu erkennen.

In Abbildung 9 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 ausgewählt. Da ein möglichst glatter Bereich gewählt werden sollte, wurde der obere linke Bereich in aus Abbildung 9 ausgewählt. In Abbildung 10 ist eine Aufnahme des Bereichs zu sehen.

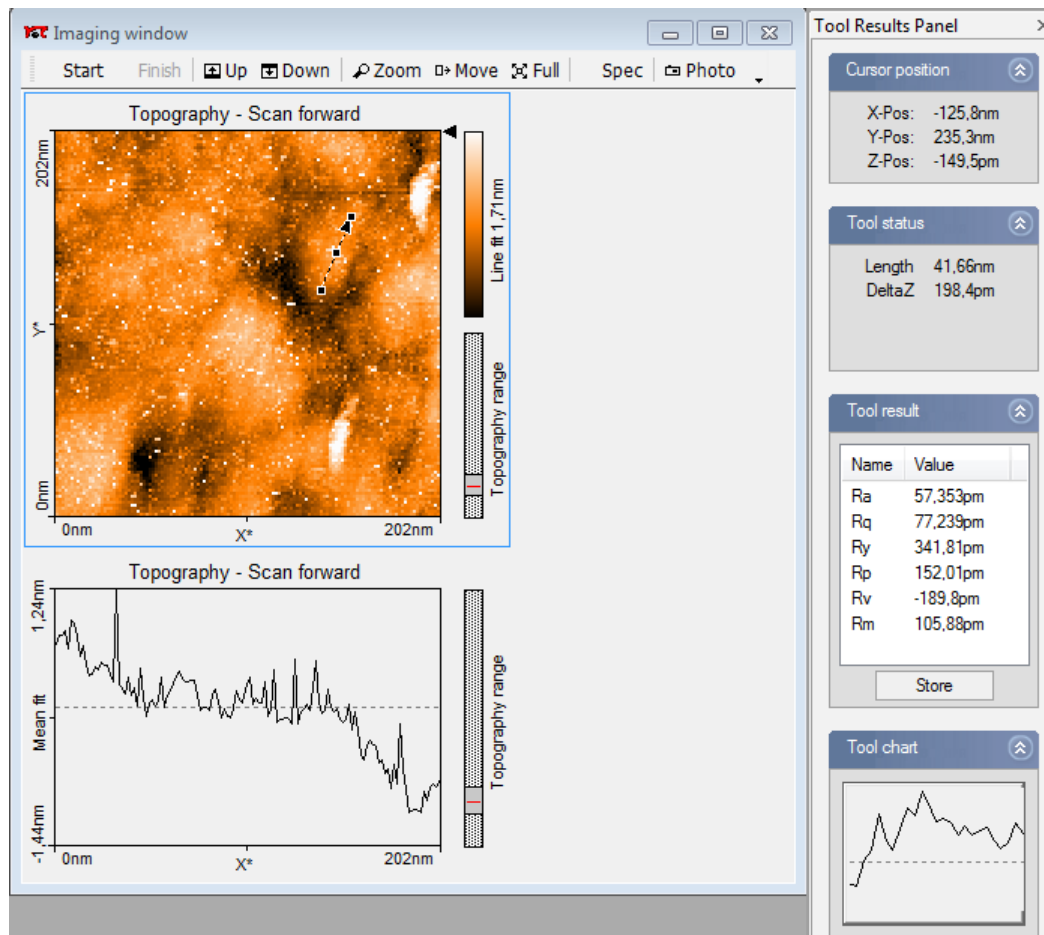
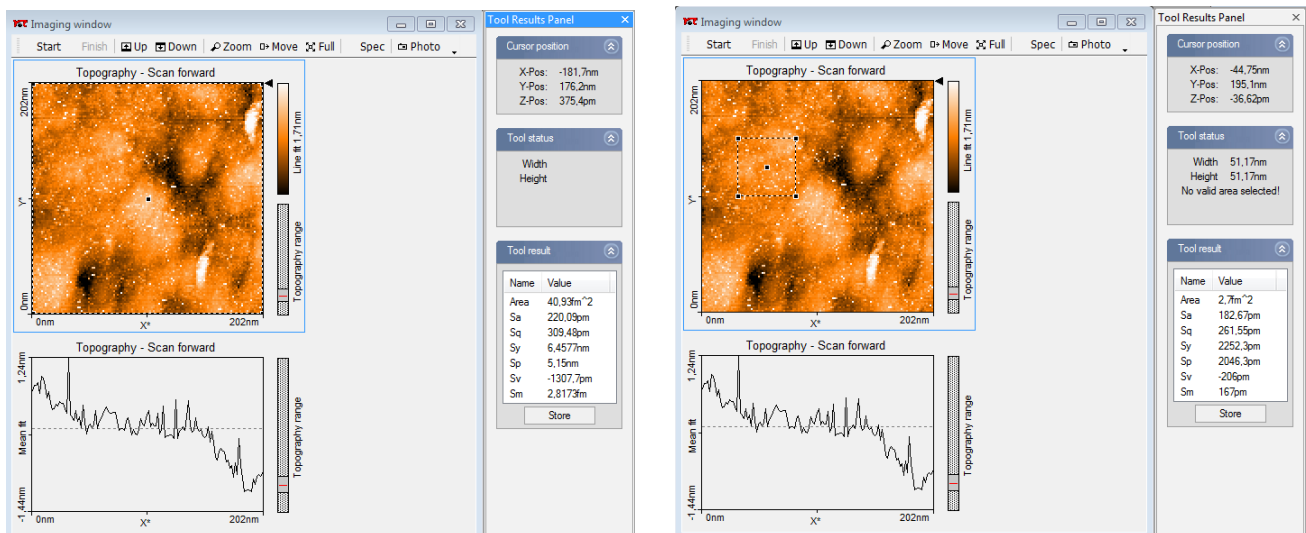


Abbildung 10: Mittlere Linienrauheit der (111)-Goldschicht ($R_a = 57.353 \text{ pm}$ und $R_q = 77.239 \text{ pm}$)



(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 Verkipfung wurde bei allen Messungen korrigiert. ($S_a = 182.67 \text{ pm}$ und $S_q = 261.55 \text{ pm}$)

Abbildung 11: Mittlere Flächenrauheit der (111)-Goldschicht

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

links bestimmt (vgl. Abbildung 11). Bei der Bestimmung der Oberflächenrauheit, wurden die Werte in Tabelle 3 bestimmt, dafür wurde die Funktion von easy2Scan verwendet.

Tabelle 3: Flächenrauheit der Goldprobe für die gesamter Flächen und die Ausschnitt in Abbildung 11

Lokalisation	S_a	S_q
Gesamter Bereich	220,09pm	309,48pm
Bereich von Abbildung 11	182,67pm	261,55pm

Die bestimmten Werte zeigen das an der glatten Stelle die Oberflächenrauheit mit S_a 182,67pm um 20% abweicht. Die Oberflächenrauheit auf der gesamten Flächen beträgt $S_a = 220,09pm$. Die Aufnahme der Linienrauheit ist in Abbildung 10 zu sehen. Es wurde eine Linienrauheit von $R_a = 57,353pm$ bestimmt, die quadratische Linienrauheit liegt bei $R_q = 77,239pm$. Die bestimmte Linienrauheit, ist ca. 3 mal so groß wie die bestimmte Flächenrauheit.

4.2.2 Monoatomare Stufen und Gitterdefekte

In diesem Abschnitt soll die atomare Struktur der Goldprobe untersucht werden.

4.3 Diskussion

5 Fazit

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 (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).