

V42

Rastertunnelmikroskopie

Celina Wieberg

celina.wieberg@tu-dortmund.de

Aaron Schink

aaron.schink@tu-dortmund.de

Durchführung: 17.11.2025

Abgabe: DATUM

TU Dortmund – Fakultät Physik

Inhaltsverzeichnis

1 Zielsetzung	3
2 Theorie	3
2.1 Tunneleffekt	3
2.2 Tunnelstrom und lokale Zustandsdichte	4
2.3 Piezoröhren	5
2.4 Gitterstruktur	7
2.4.1 Graphen	7
2.4.2 Gold	8
2.4.3 Fazit	9
2.5 PID-Regler	9
3 Durchführung	11
4 Auswertung	12
4.1 HOPG	13
4.2 Gold	16
5 Diskussion	21
6 Originaldaten	21
Literatur	21

1 Zielsetzung

Ziel des Versuchs ist das praktische Kennenlernen und die Anwendung des Rastertunnelmikroskops (STM). Konkret sollen reproduzierbare atomare Aufnahmen der HOPG-Oberfläche erzeugt und die hexagonale Gitterstruktur sichtbar gemacht werden. Aus diesen Bildern wird die Gitterkonstante quantitativ bestimmt, einerseits mittels pixelbasierter Auswertung durch Einzeichnen von Basisvektoren und Kalibrierung, andererseits mittels Fourier-Transformation, außerdem wird ein Vergleich der Methoden einschließlich Fehlerabschätzung durchgeführt. Für die Goldprobe werden topographische Sprunghöhen aus mehreren Profilen extrahiert und ausgewertet. Zusätzlich soll die exponentielle Abstandsabhängigkeit des Tunnelstroms qualitativ verifiziert werden und der Einfluss typischer Störfaktoren identifiziert und minimiert werden. Abschließend werden die Wirkung und sinnvolle Einstellung eines PID-Reglers für stabilen Konstantstrom-Betrieb demonstriert.

2 Theorie

2.1 Tunneleffekt

Der Tunneleffekt ist ein rein quantenmechanisches Phänomen, bei dem Teilchen eine klassisch unüberwindbare Potentialbarriere mit endlicher Wahrscheinlichkeit durchdringen. Im Rastertunnelmikroskop führt dies dazu, dass Elektronen zwischen einer metallischen Spalte und der Probenoberfläche durch die Vakuumbarriere tunneln, obwohl ihre Energie unter der effektiven Barrierenhöhe liegt. Da die Tunnelwahrscheinlichkeit stark vom Abstand zwischen Spalte und Probe abhängt, lässt sich über die Messung des Tunnelstroms die Topographie der Oberfläche mit atomarer Auflösung rekonstruieren. Zur quantitativen Beschreibung betrachtet man ein Elektron mit Energie E in einer eindimensionalen Barriereregion mit konstanter effektiver Barrierenhöhe Φ über der Fermienergie und Breite d . Die zeitunabhängige Schrödingergleichung in der Barriereregion lautet

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + (\Phi - E)\psi = 0. \quad (1)$$

Für $E < \Phi$ ergibt sich ein reeller Dämpfungsparameter

$$\kappa = \frac{\sqrt{2m(\Phi - E)}}{\hbar}, \quad (2)$$

wodurch die Wellenfunktion in der Barriereregion exponentiell abklingt, $\psi(x) \propto e^{-\kappa x}$. Die Transmissionswahrscheinlichkeit durch die Barriere skaliert in führender Näherung wie

$$T \propto e^{-2\kappa d}.$$

Bei kleinen Biasspannungen und unter der Annahme, dass die Zustandsdichten der Spalte und der Probe in der betrachteten Energiezone annähernd konstant sind, ist der

gemessene Tunnelstrom proportional zur Transmission und zur Spannung V . Daraus folgt die zentrale Auswertungsrelation für das STM:

$$I(d) \propto V \rho_t(E_F) \rho_s(E_F) e^{-2\kappa d}, \quad (3)$$

wobei $\rho_t(E_F)$ und $\rho_s(E_F)$ die Zustandsdichten an der Fermienergie der Spitze bzw. Probe bezeichnen. Für typische Metallspitzen gilt $E \ll \Phi$ und man setzt $\kappa \approx \sqrt{2m\Phi}/\hbar$, sodass häufig verwendet wird

$$I(d) \propto e^{-2\kappa d}, \quad \kappa \approx \frac{\sqrt{2m\Phi}}{\hbar}. \quad (4)$$

2.2 Tunnelstrom und lokale Zustandsdichte

Der gemessene Tunnelstrom enthält neben Topographieinformation auch direkte elektronische Information der Probe, da er aus den energetischen Übergängen zwischen besetzten Zuständen der einen Elektrode und unbesetzten Zuständen der anderen entsteht und durch die Tunneltransmission gewichtet wird. Für kohärentes, elastisches Tunneln lässt sich der Gleichstrom bei angelegter Spannung V allgemein als Energieintegral über die Produktionen der Zustandsdichten und der Transmission schreiben.

$$I(V) \propto \int_{-\infty}^{\infty} \rho_t(E - eV) \rho_s(E) T(E, d) [f(E - eV) - f(E)] dE, \quad (5)$$

wobei ρ_t und ρ_s die elektronischen Zustandsdichten von Spitze und Probe, $T(E, d)$ die energie- und abstandsabhängige Tunneltransmission und $f(E)$ die Fermi-Verteilungsfunktion sind. Unter den in STM-Experimenten üblichen Bedingungen wie geringe Temperatur, kleine Biasspannungen, und eine Spitze mit annähernd konstanter DOS im betrachteten Energiebereich, ist die Besetzungs differenz auf ein schmales Energiefenster um die Fermi-Energie beschränkt. Dann reduziert sich das Integral im führenden Näherungsgrad auf das integrierte Spektrum der Probenzustandsdichte im Fenster zwischen E_F und $E_F + eV$. In der Tersoff–Hamann-Nähe, bei der die Spitze als s-symmetrisches, energetisch flaches Reservoir modelliert wird und das Tunnelmatrixelement proportional zur Probenwellenfunktion an der Spitzensposition \mathbf{r}_0 ist, folgt die gebräuchliche Näherung

$$I(V, \mathbf{r}_0) \propto \int_{E_F}^{E_F + eV} \rho_s(\mathbf{r}_0, E) dE, \quad (6)$$

woraus durch Differentiation nach V die zentrale Relation der spektroskopischen Auswertung resultiert.

$$\frac{dI}{dV}(V, \mathbf{r}_0) \propto \rho_s(\mathbf{r}_0, E_F + eV). \quad (7)$$

Damit stellt dI/dV unter den genannten Näherungen ein direktes Maß für die lokale Zustandsdichte der Probe bei der entsprechenden Energie dar und bildet die Grundlage der Scanning Tunneling Spectroscopy.

Exponentielle Zerfallsrate κ

Die exponentielle Zerfallsrate κ charakterisiert den räumlichen Abfall der elektronischen Wellenfunktion innerhalb der Vakuumbarriere und verbindet die effektive Barrierenhöhe mit der Abstandabhängigkeit der Tunnelwahrscheinlichkeit. Betrachtet man ein eindimensionales Potential mit konstanter Barrierenhöhe Φ oberhalb der Elektronenenergie E (für $E < \Phi$), lautet die zeitunabhängige Schrödingergleichung in der Barriereregion

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + (\Phi - E)\psi = 0. \quad (8)$$

Für konstantes Φ führt dies zu Lösungen exponentiellen Typs. Mit der Definition des Dämpfungsparameters

$$\kappa = \frac{\sqrt{2m(\Phi - E)}}{\hbar} \quad (9)$$

fällt die Wellenfunktion in der Barriereregion wie $\psi(x) \propto e^{-\kappa x}$ ab. Die Transmissionswahrscheinlichkeit T durch eine Barrierendicke d skaliert in führender Näherung mit dem Quadrat der Amplitude am Barriereende, sodass gilt

$$T \propto e^{-2\kappa d}. \quad (10)$$

Im STM-Kontext ist der Tunnelstrom proportional zur Transmission, woraus die zentrale Abstand-Strom-Relation folgt.

$$I(d) \propto e^{-2\kappa d}. \quad (11)$$

Für Energien nahe dem Fermiplateau wird häufig $E \ll \Phi$ angenommen, womit sich die gebräuchliche Näherung

$$\kappa \approx \frac{\sqrt{2m\Phi}}{\hbar} \quad (12)$$

ergibt. Umgekehrt lässt sich aus einem bestimmten experimentellen κ die effektive Barrierenhöhe berechnen durch

$$\Phi = \frac{(\hbar\kappa)^2}{2m}. \quad (13)$$

Damit verbindet κ die quantenmechanische Beschreibung der Wellenfunktion in der Barriereregion direkt mit der makroskopisch beobachtbaren exponentiellen Abhängigkeit des Tunnelstroms vom Spitzendistanz d .

2.3 Piezoröhren

Piezoröhren sind zylindrische Aktuatoren aus piezoelektrischer Keramik, deren Innen- und Außenflächen mit segmentierten Elektroden metallisiert sind. Durch Polung der ferroelektrischen Domänen während der Herstellung wird eine reversible elektromechanische Kopplung etabliert. Anlegen einer elektrischen Spannung an die Elektroden erzeugt

eine lokale Deformation der Rohrwand, die in geeigneter Kombination axiale Längenänderungen (Z-Achse) sowie Biege- und Torsionsanteile (X,Y-Richtungen) hervorruft. Im Rastertunnelmikroskop dient die Piezoröhre als Feinantrieb für die genaue Positionierung von Spitze bzw. Probe. Typische maximale Ausschläge liegen im Bereich weniger Nanometer aufgrund der exponentiellen Abhängigkeit des Tunnelstroms vom Abstand. Für kleine elektrische Felder lässt sich die axiale Längenänderung in linearer Näherung schreiben:

$$\Delta L \approx d_{33} L_0 E = d_{33} L_0 \frac{V}{t}, \quad (14)$$

wobei d_{33} der piezoelektrische Koeffizient, L_0 die nominale Länge, t die Wandstärke und V die angelegte Spannung ist. Diese lineare Relation ist jedoch nur eine erste Näherung, für reale Piezoröhren sind mehrere nichtlineare und zeitabhängige Phänomene von Bedeutung, die die Qualität von STM-Messungen direkt beeinflussen. Fünf zentrale Effekte sind experimentell relevant: Hysterese, Kreep, Nichtlinearität/Skalenabweichung, Kopplung zwischen Achsen (Cross-Talk) und mechanische Resonanzen. Hysterese führt zu unterschiedlicher Verschiebung bei auf- und ablaufender Spannung und erzeugt dadurch systematische Positionsfehler, welche sich in Rasterverzerrungen und Asymmetrien äußern. Kreep bezeichnet die zeitabhängige Nachbewegung nach einem Spannungssprung und verursacht langsame Drift im Scanbild. Dieser Effekt ist besonders kritisch bei langsamen Linienraten oder beim Abtasten feiner Strukturen. Nichtlinearität und veränderliche Skalenfaktoren bedingen Volt-Abweichungen über den Arbeitsbereich und führen zu Maßstabsfehlern. Cross-Talk entsteht, weil eine Ansteuerung eines Segments parasitäre Bewegungen in den anderen Achsen induziert, ohne Korrektur erscheinen Rotations- oder Scherartefakte. Mechanische Eigenmoden von Röhre und Montage können bei bestimmten Anregungsfrequenzen resonant angeregt werden und sind Ursache für periodische Artefakte bei zu hohen Scanraten. Diese Effekte lassen sich nicht vollständig eliminieren, aber teilweise kompensieren. Geschlossene Regelkreise mit kapazitiven oder interferometrischen Wegsensoren ermöglichen echtes Closed-Loop-Feedback und reduzieren Hysterese und Kreep erheblich, sofern Sensorsauflösung und Bandbreite ausreichend sind. Fehlt eine direkte Wegmessung, so kann eine regelmäßige Kalibrierungen an Referenzgittern helfen, verlässlichere Messwerte zu erzielen. Vor Messreihen sind Kalibrierungen der Volt-Skalierung und der Achsentopologie durchzuführen. Aufnahmen in Vorwärts- und Rückwärtsrichtung liefern Hinweise auf Hystereseeffekte und erlauben Korrekturen, langsame Linienraten und ausreichende thermische Stabilisierung reduzieren Kreep- und Driftfehler. FFT-gestützte Auswertungsschritte sind vorzuziehen, da periodische Strukturen so präziser im Frequenzraum bestimmt und systematische Verzerrungen identifiziert werden können. Ebenso sind bei der Bestimmung von Sprunghöhen auf Gold die Höhenkalibrierung und die Eliminierung von Spitzenartefakten essenziell, da die lateralen und vertikalen Sensitivitäten der Piezoröhre sowie mögliche Cross-Talk-Beiträge direkten Einfluss auf die gemessenen Werte haben. Als technische Alternativen zu Piezoröhren kommen piezostack-Aktuatoren, bimorphe Biegebalken sowie Kombinationen aus Grobverstellern (Inchworm bzw. stick-slip-Mechanismen) und feinen Piezoaktoren in Betracht.

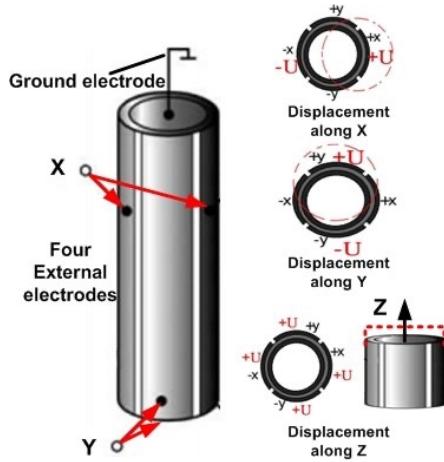


Abbildung 1: Aufbau und Funktionsweise des piezoelektrischen Rohraktuators [2].

2.4 Gitterstruktur

2.4.1 Graphen

Graphen ist eine einzelne Schicht des Graphitgitters und bildet ein zweidimensionales, hexagonales Kohlenstoffnetzwerk. Jedes Kohlenstoffatom ist sp^2 -hybridisiert und bindet kovalent an drei Nachbarn in der Ebene. Die verbleibenden p_z -Orbitale bilden delokalisierte π -Zustände senkrecht zur Ebene, die die charakteristische elektronische Struktur erzeugen. Die in-plane Gitterkonstante beträgt $a \approx 0.246$ nm, der nächste Nachbarabstand $a_{CC} \approx 0.142$ nm. Die Fläche der Einheitszelle und die Flächendichte der Atome sind gegeben durch

$$A_{uc} = \frac{\sqrt{3}}{2} a^2, \quad \sigma = \frac{2}{A_{uc}} = \frac{4}{\sqrt{3} a^2}. \quad (15)$$

Für kontextbezogene Betrachtungen der STM-Messung sind die reellen Basisvektoren der zweidimensionalen Bravais-Gitterdarstellung und die zugehörigen reziproken Gittervektoren nützlich. Eine gebräuchliche Wahl der reellen Basisvektoren lautet

$$\mathbf{a}_1 = a (1, 0), \quad \mathbf{a}_2 = a \left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} \right), \quad (16)$$

wobei die Einheitszelle zwei Basisatome enthält. Die zugehörigen reziproken Basisvektoren ergeben sich aus $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$ und können in der obigen Koordinatendarstellung geschrieben werden als

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a} \left(1, -\frac{1}{\sqrt{3}} \right), \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a} \left(0, \frac{2}{\sqrt{3}} \right). \quad (17)$$

Die Lage der Dirac-Punkte in der reziproken Ebene lässt sich mit diesen Vektoren ausdrücken; ein K-Punkt ist gegeben durch

$$\mathbf{K} = \frac{4\pi}{3a} (1, 0) = \frac{1}{3} \mathbf{b}_1 + \frac{2}{3} \mathbf{b}_2, \quad (18)$$

wodurch die in der Theorie wichtigen linear dispersiven Bereiche um \mathbf{K} und $\mathbf{K}' = -\mathbf{K}$ unmittelbar verknüpft sind mit den Periodizitäten, die in FFT-Analysen von STM-Bildern nachweisbar sind.

Im reziproken Raum treten die Dirac-Punkte an den K-Punkten auf, die Dispersion nahe diesen Punkten ist annähernd linear und lässt sich schreiben als

$$E(\mathbf{k}) = \pm \hbar v_F |\mathbf{k}|, \quad (19)$$

mit $v_F \approx 10^6$ m/s. Die elektronische Zustandsdichte eines idealen, ungestörten monolagigen Graphens skaliert näherungsweise wie $\rho(E) \propto |E|$ und verschwindet bei den Dirac-Punkten. HOPG liefert aufgrund der gut orientierten Graphenschichten und der ausgeprägten π -Zustände einen starken, periodischen elektronischen Kontrast. Die atomare Periodizität und die hohe laterale Homogenität führen zu scharfen, gut zuordnenbaren Peaks in der 2D-Fourier-Transformation, weshalb HOPG als Lateralkalibrierstandard und Referenzgitter weit verbreitet ist. Frisch aufgebrochene HOPG-Flächen sind leicht reproduzierbar, was die experimentelle Vergleichbarkeit verbessert. Einschränkungen ergeben sich durch Sublattice-abhängige Kontraste, sowie lokale Defekte, die lokale Abweichungen verursachen.

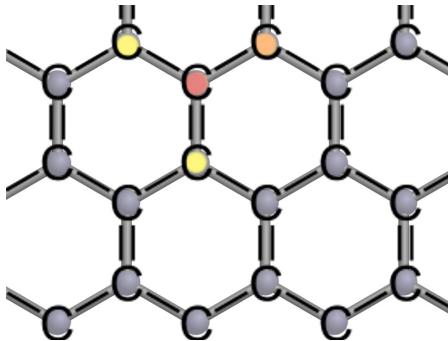


Abbildung 2: Schematische Darstellung der Gitterstruktur von Graphen [1].

2.4.2 Gold

Gold kristallisiert im kubisch-flächenzentrierten (fcc) Gitter mit der Gitterkonstante a_0 (Raumtemperatur: $a_0 \approx 0.408$ nm). Für die (111)-Ebene ergeben sich die charakteristischen Längenskalen

$$a_{NN} = \frac{a_0}{\sqrt{2}} \approx 0.288 \text{ nm}, \quad h_{111} = \frac{a_0}{\sqrt{3}} \approx 0.236 \text{ nm}. \quad (20)$$

Allgemein gilt für den Netzebenenabstand der Miller-Indizes (hkl)

$$d_{hkl} = \frac{a_0}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}. \quad (21)$$

Die Fläche der primitiven Zelle der (111)-Ebene sowie die Oberflächenatomdichte sind

$$A_{111} = \frac{\sqrt{3}}{2} a_{\text{NN}}^2 = \frac{\sqrt{3}}{4} a_0^2, \quad \sigma_{111} = \frac{1}{A_{111}} = \frac{4}{\sqrt{3} a_0^2}. \quad (22)$$

Elektronisch dominieren bei Gold delokalisierte s- und d-Elektronen. Oberflächennaher Zustände und Rekonstruktionen modifizieren die ideale Oberflächenstruktur. Gold eignet sich besonders zur Untersuchung von monoatomaren Stufen und Oberflächenrekonstruktionen, da die Stufenhöhen klar definierte Vertikalskalen liefern. Die atomaren topographischen Amplituden sind jedoch klein (Sub-Å-Bereich) und der laterale atomare Kontrast in oberflächenempfindlichen Techniken wie STM hängt stark von Spitzengeometrie, Bias und elektronischer Struktur ab. Rekonstruktive Superstrukturen überlagern den reinen Gitterkontrast und erschweren die direkte Bestimmung der atomaren Gitterkonstante, daher sind höhere Anforderungen an Probenvorbereitung, Spitzenzustand und Auswertemethoden nötig.

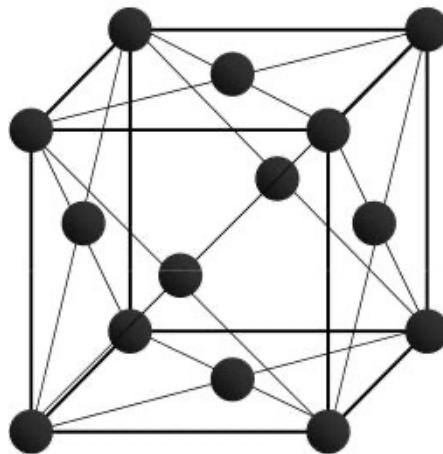


Abbildung 3: Aufbau eines fcc-Gitters [7].

2.4.3 Fazit

Die angegebenen geometrischen und elektronischen Ausdrücke verknüpfen die atomare Anordnung direkt mit relevanten Längen- und Energieskalen. HOPG/Graphen bietet durch seine ausgeprägte, elektronisch dominante atomare Signatur und einfache Probenvorbereitung eine robuste Grundlage für laterale Kalibrierung und präzise Bestimmung der Gitterkonstante. Gold liefert zuverlässige Informationen über Terrassenhöhen und Oberflächenrekonstruktionen, erfordert aber für atomare Gittervermessungen erhöhte experimentelle Sorgfalt.

2.5 PID-Regler

Ein PID-Regler besteht aus drei Anteilen: proportional (P), integral (I) und differential (D) — und übersetzt die Abweichung des gemessenen Tunnelstroms vom Sollwert in

eine Stellgröße für die Z-Position des Piezoaktors. Formal lässt sich die Stellgröße in Zeitdomäne schreiben als

$$u(t) = K_P e(t) + K_I \int_0^t e(\tau) d\tau + K_D \frac{de(t)}{dt}, \quad (23)$$

wobei $e(t)$ der Regelabweichung entspricht und K_P , K_I , K_D die Verstärkungsfaktoren der jeweiligen Anteile sind. Physikalisch wird diese Stellspannung über den piezoelektrischen Effekt in eine Längenänderung umgesetzt. Die vom Regler erzeugte elektrische Ansteuerung $u(t)$ ist damit die Eingangsgröße für das mechanische Subsystem des Scanners. Die mechanische Dynamik des durch die Piezoansteuerung bewegten Teils lässt sich in guter Näherung durch ein gedämpftes Massen-Feder-System beschreiben. Für die effektive Koordinate $x(t)$ des bewegten Teils gilt dann

$$m\ddot{x} + c\dot{x} + kx = F_{\text{drive}}(t), \quad (24)$$

wobei m die effektive Masse, c die Dämpfung, k die effektive Steifigkeit der Baugruppe und $F_{\text{drive}}(t)$ die durch das Piezoelement erzeugte Antriebskraft darstellt. Die Stellspannung $u(t)$ ist über die Piezocharakteristik proportional zur erzeugten Deformation und somit indirekt mit $F_{\text{drive}}(t)$ verknüpft. Nichtlineare Effekte wie Piezo-Hysterese und Kreep sowie Kopplungen an statische Vorspannung und Kontaktbedingungen modifizieren diese Beziehung. Physikalisch wirkt der proportionale Anteil $K_P e(t)$ als unmittelbares Stellsignal proportional zur aktuellen Regelabweichung, in mechanischer Sprache bedeutet das eine schnelle Änderung von $F_{\text{drive}}(t)$ und damit erhöhte Beschleunigungsanforderungen an die Masse m . Große Beschleunigungsanteile erzeugen hohe Trägheitskräfte $m\ddot{x}$, können den Übergang von Haftung zu Gleiten in piezo-inertialen Kontakten begünstigen und mechanische Eigenmoden anregen. Der integrale Anteil $K_I \int_0^t e(\tau) d\tau$ akkumuliert langfristige Fehler und verschiebt so die mittlere Stellposition, wodurch langsame systematische Abweichungen wie Piezo-Kreep oder thermisch bedingte Drift ausgeglichen werden. Diese sukzessive Anpassung entspricht einer langsamen Änderung des Mittelwerts von $F_{\text{drive}}(t)$ und somit von $x(t)$. Da die Kontaktkräfte (statische Haftkraft F_{stick} , kinetische Reibung F_{kin}) in der Praxis variabel sind, kann das Integral jedoch falsche Korrekturen aufsummieren. Der differentielle Anteil $K_D de/dt$ reagiert auf die Änderungsrate des Fehlers und wirkt dämpfend auf schnelle Störungen. Physikalisch entspricht dies einer zusätzlichen viskosen Dämpfung der schnellen Dynamik und reduziert Überschwingen, verstärkt jedoch hochfrequentes Messrauschen, sofern vor der Differentiation keine geeignete Filterung erfolgt.

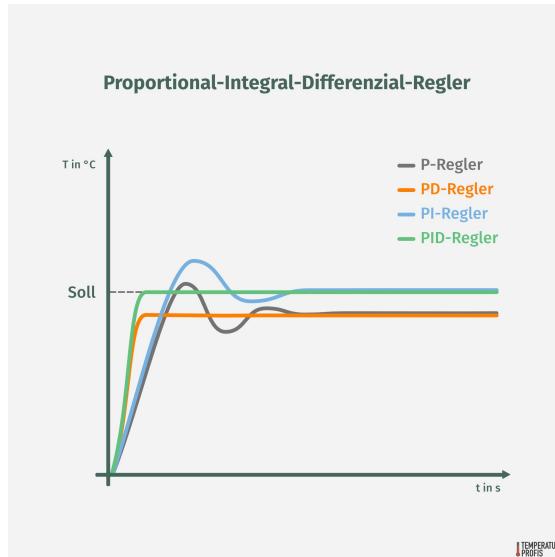


Abbildung 4: Vergleich der synchron aufgezeichneten Signale eines PID-Reglers [6].

3 Durchführung

Zu Beginn der Versuchsdurchführung sorgt man für saubere Arbeitsbedingungen und trägt durchgehend fusselfreie Handschuhe. Sichtbare Oberflächen, Probenträger und Tip-Halter werden mit Ethanol gereinigt, lose Partikel werden entfernt und das Gerät wird auf offensichtliche Beschädigungen kontrolliert. Für die Spitze wird aus dem gewählten Draht eine möglichst scharfe, idealerweise einatomige Spitze hergestellt. Mit einer Zange wird der Draht fixiert und mit einer weiteren wird der Draht gedrückt und durch kontrolliertes entlangziehen unter konstantem Druck eine optimale Bruchachse gefunden. Vor dem Einsetzen in den Tip-Holder überprüft man die elektrische Verbindung und die mechanische Klemmung, setzt die Spitze vorsichtig ein und schiebt den Tip-Holder in das STM. Die Glasabdeckung wird geschlossen, sofern nicht an Anschlüssen gearbeitet wird. Die Proben werden unmittelbar vor dem Einbau vorbereitet. HOPG wird frisch geschält und mit saubereren Werkzeugen handhabbar gemacht, die Goldprobe wird mit saubereren Pinzetten eingesetzt. Beide Proben werden plan und zentriert im Probenhalter fixiert, sodass beim Einfahren keine benachbarten Bauteile oder Hebel berührt werden können. Beim Einführen der Spitze in die vorgesehene Nut von rechts wird darauf geachtet, empfindliche Hebel nicht zu berühren. Die Spitze wird später gerade und ohne Kippen herausgezogen, um mechanische Beschädigungen zu vermeiden. Man stellt sicher, dass keine offensichtlichen Störquellen vorhanden sind. Die ADVANCE-Funktion oder der automatische Approach wird gestartet und während des Annäherns beobachtet man die Reflexion der Spitze auf der Probe als visuelle Abstandskontrolle. Wenn ein messbarer Tunnelstrom registriert wird, wird das Feedback aktiviert und die Scannersteuerung eingeschaltet. Für HOPG werden zunächst Übersichtsaufnahmen mit großer Feldgröße aufgenommen, um die allgemeine Bildqualität und die Ebenheit der Probe zu bewerten.

Falls die Scanlinie zwar gerade, aber nicht flach ist, wurde die Probenlage mechanisch nachjustiert. Bei diffuser oder verschwommener Darstellung wurde die Spitze neu aufbereitet, solange bis eine gerade, klare Linie zu erkennen ist. Anschließend werden schrittweise Vergrößerungen vorgenommen. Es werden vier bis acht hochauflöste Bilder aus verschiedenen Regionen der Probe aufgenommen, und für jede Aufnahme werden Bias, Setpoint, Scanrate, Pixelanzahl und Scanrichtung dokumentiert. Für die Goldprobe erfolgt die Annäherung und Bildaufnahme analog, wobei besonderer Wert auf die Speicherung der Topographie (Z-Daten) gelegt wird, da die Auswertung auf Höhensprüngen und Terrassen beruht. Geeignete Setpoints und Scanraten werden entsprechend den Gerätevorgaben gewählt. Während der Messung werden die Auswirkungen der PID-Regelung beobachtet und bei Bedarf angepasst, damit der Regelkreis stabil arbeitet. Alle Rohdaten werden unmittelbar gesichert, systematisch benannt und in einer klaren Ordnerstruktur abgelegt. Nach Abschluss der Messungen fährt man den Scanner vollständig zurück, stellt die ADVANCE-Funktion zurück, entfernt die Spitze vorsichtig und entnimmt die Proben. Das Instrument wird abgedeckt und der Arbeitsbereich gereinigt.



Abbildung 5: Der Versuchsaufbau inklusive eingebauter Probe.

4 Auswertung

Für die Auswertung wird die Python-Bibliothek `numpy` [3] benutzt. Mögliche Fits entstehen mit `curve_fit` aus `scipy.optimize`. [8]. Die Fehlerrechnung wird mit `uncertainties` [5] durchgeführt. Plots entstehen mit `matplotlib.pyplot` [4]. Bildbearbeitungen für

das HOPG werden mit `skimage` durchgeführt. Die Auswertung der Goldprobe wird mit `Gwyddion` durchgeführt.

4.1 HOPG

Um Rauschartefakte zu unterdrücken, werden die Messungen der HOPG-Probe mit einem Gauß-Filter versehen. Anschließend werden die Intensitäten fouriertransformiert. Die Abstände benachbarter Peaks im reziproken Raum entsprechen den reziproken Gittervektoren zwischen den hellen Spots im Realraum. Diese Abstände werden errechnet und über ?? in die Abstände heller Spots im Realraum rücktransformiert. Für jedes Bild werden die entstandenen Abstände gemittelt.

Die Daten sind in Abbildung 6, 7, 8, 9, 10 links dargestellt, ihre Fouriertransformierten rechts.

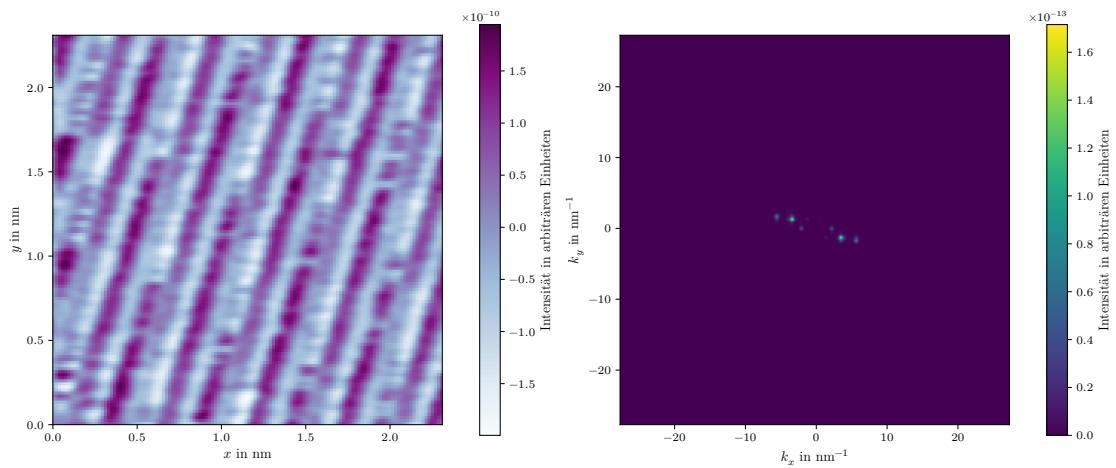


Abbildung 6: Aufgenommenes Realraum-Bild und die Fouriertransformierte. Erkennbar sind Probleme in der Aufnahme, aber eine Periodizität bleibt bestehen.

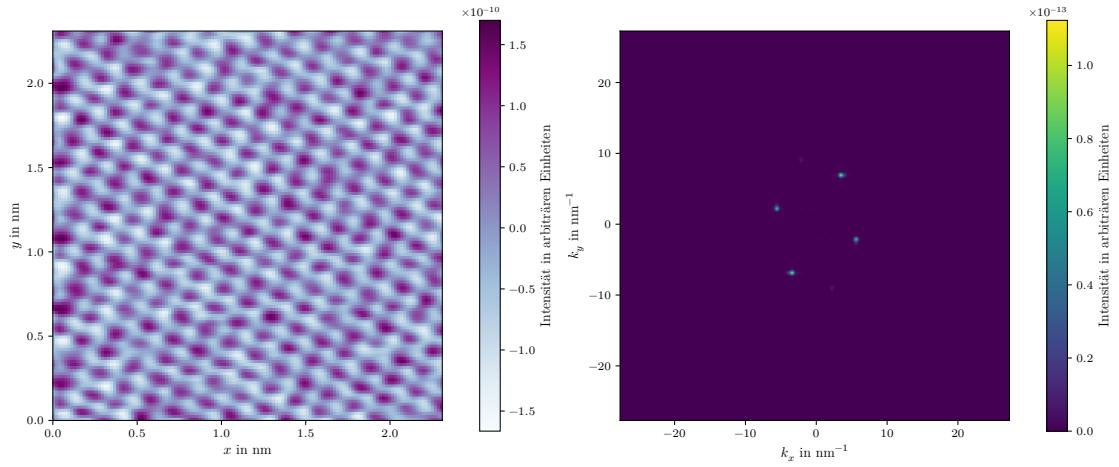


Abbildung 7: Aufgenommenes Realraum-Bild und die Fouriertransformierte. Die Fouriertransformation deutet auf eine sehr schwache Periodizität in einer der sechs Symmetrieeachsen.

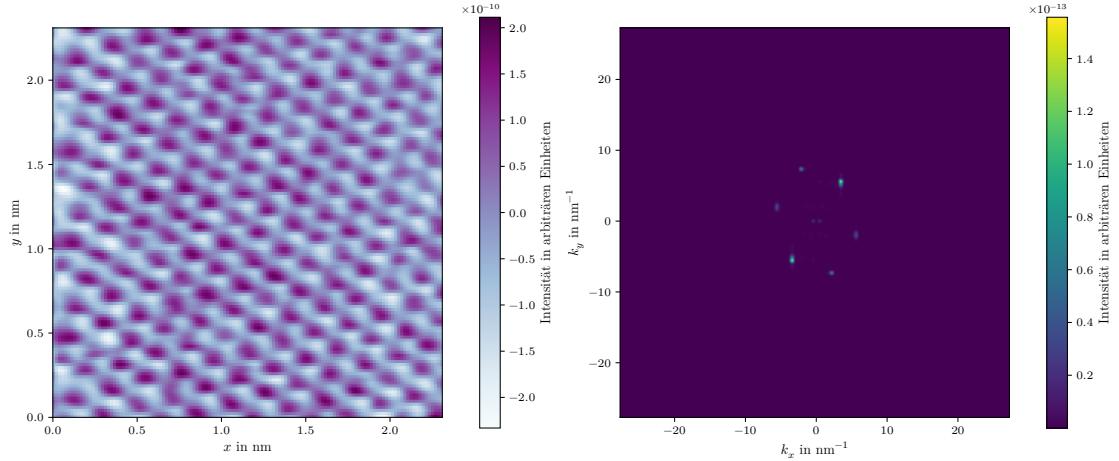


Abbildung 8: Aufgenommenes Realraum-Bild und die Fouriertransformierte.

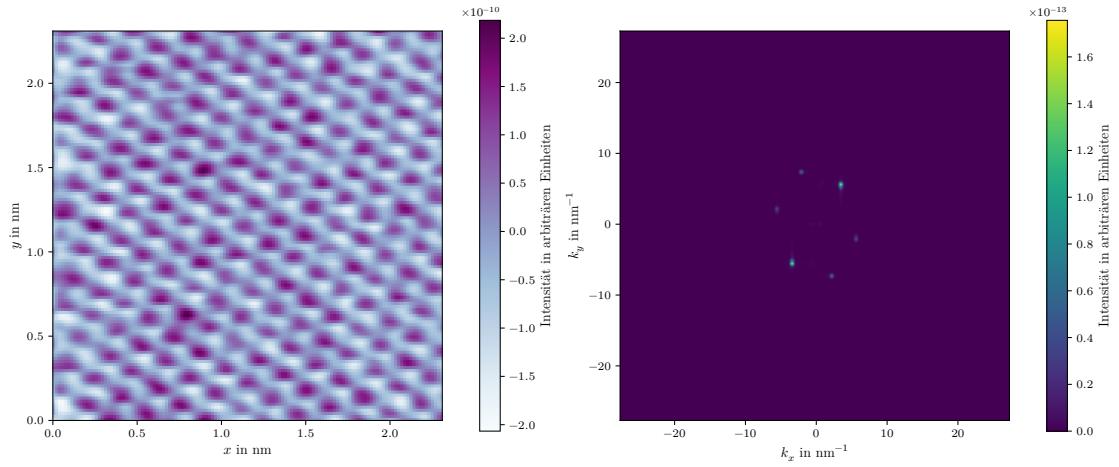


Abbildung 9: Aufgenommenes Realraum-Bild und die Fouriertransformierte.

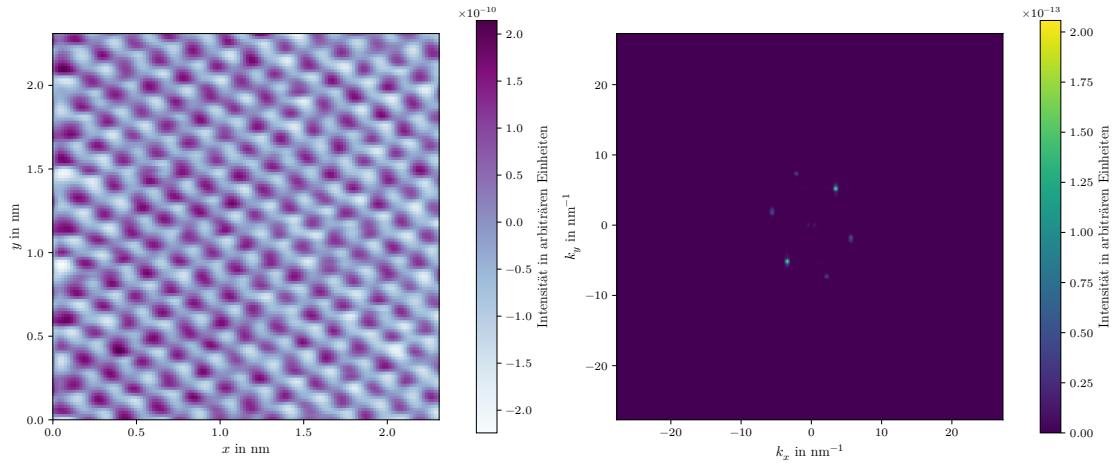


Abbildung 10: Aufgenommenes Realraum-Bild und die Fouriertransformierte.

Der Messung in Abbildung 6 ist nicht nähere Betrachtung zu schenken, da sie fehlerhaft ist. Die „Schlieren“, die dort zu sehen sind, sind bei jedem Scan in Rückwärtsrichtung aufgetreten, was auf eine unperfekte Nadel hindeutet, die in dieser Richtung an der Probe hängen bleibt. Allerdings fällt eine gewisse Periodizität auf, die auch durch die Fouriertransformation bestätigt wird, da diese immer noch vor allem zwei besonders helle Punkte aufweist. Die Messung in Abbildung 7 zeigt in der Fouriertransformierten eine schwache Periodizität in einer der Symmetrieachsen der entstehenden Hexagons, ist aber dennoch messbar. Alle Messungen scheinen eine gewisse Verzerrung in eine Richtung zu besitzen, die mit dem Auge nicht sofort erkennbar ist. Die Fouriertransformierte ist für keine Messung ein regelmäßiges Sechseck, sondern in k_x Richtung etwas dünner als in k_y . Mit diesem Wissen ist erkennbar, dass, entsprechend ??, die Spots etwas flacher und breiter erscheinen. Des Weiteren sind in Abbildung 8, 9 und 10 im Zentrum schwache

Stellen erkennbar, die aufgrund ihrer Ausrichtung eine sehr schwache Periodizität in y -Richtung hindeuten, die allerdings nicht optisch erkennbar ist.

Die für die erfolgreichen Messungen berechneten Gitterkonstanten sind

$$\begin{aligned}r_1 &= (0,150 \pm 0,011) \text{ nm} \\r_2 &= (0,171 \pm 0,010) \text{ nm} \\r_3 &= (0,171 \pm 0,011) \text{ nm} \\r_4 &= (0,174 \pm 0,005) \text{ nm}\end{aligned}$$

Was zu einer mittleren Gitterkonstanten von

$$\bar{r} = (0,167 \pm 0,005) \text{ nm}$$

führt. Die Abweichung vom Literaturwert von $a = 0,246 \text{ nm}$ beträgt 32,3 %.

4.2 Gold

Für Gold können keine atomar aufgelösten Bilder gemacht werden, aber aus den Messungen mit dem Mikroskop lassen sich Informationen über Schichtdicken gewinnen. Mit **Gwyddion** können die Messungen nachbearbeitet werden. Dafür werden sie zuerst geebnet und anschließend das Minimum der Daten auf null gesetzt. Für die Auswertung der Höhe wird ein vom Programm bereitgestelltes Tool benutzt, das die Höhenverteilung in ausgewählten Bereichen darstellt. Dafür wird eine 35 mal 35 Pixel große Fläche händisch über das Scanbild gefahren und in Echtzeit die statistische Verteilung der Höhen beobachtet. Es können optisch auf dem aufgenommenen Bild bereits Stellen ausgemacht werden, an denen Höhenunterschiede sichtbar sind. Wenn die Statistik mindestens zwei eindeutige Peaks zeigt, werden diese in dem Plot der Höhenverteilungen markiert und die Differenz der entsprechenden Höhen ausgerechnet. Dies wird für den ersten Vorwärtsscan drei Mal wiederholt. Für den zweiten Vorwärtsscan sowie den zugehörigen Rückwärtsscan wird dies je ein Mal durchgeführt.

Die ausgewählten Bereiche sind in Abbildung 11, 15 und ??, die entsprechenden Statistiken in Abbildung 12, 13, 17, 16 und 18 dargestellt.

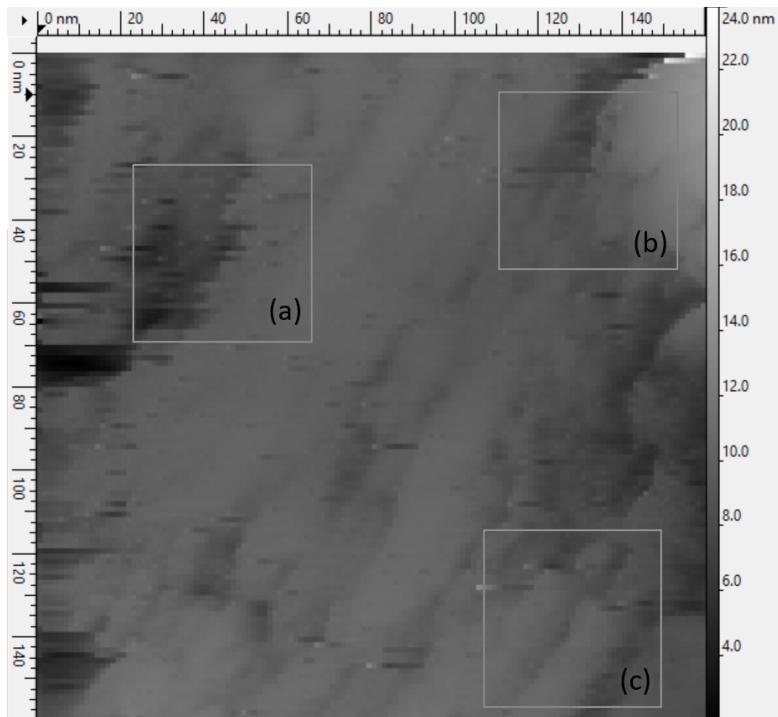


Abbildung 11: Die ausgewählten Bereiche des ersten Vorwärtsscans, betitelt (a), (b) und (c). Es sind Kontraste erkennbar. Grafik entnommen aus Gwyddion.

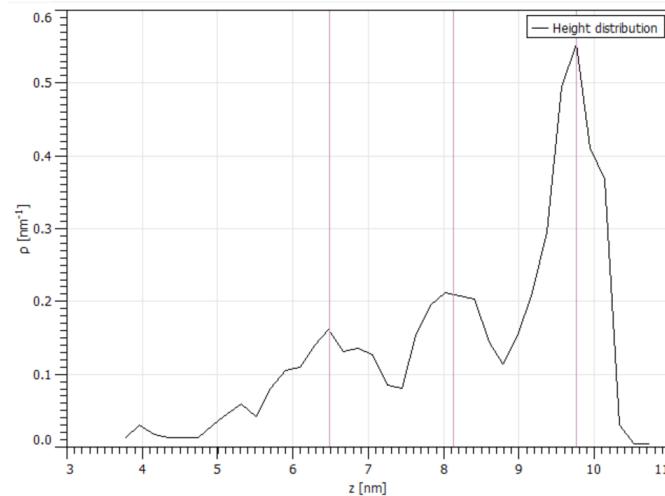


Abbildung 12: Die Höhenverteilung von Bereich (a) in Abbildung 11. Es sind drei äquidistante Höhen erkennbar, die viel häufiger vorkommen, die hier markiert werden. Grafik entnommen aus Gwyddion.

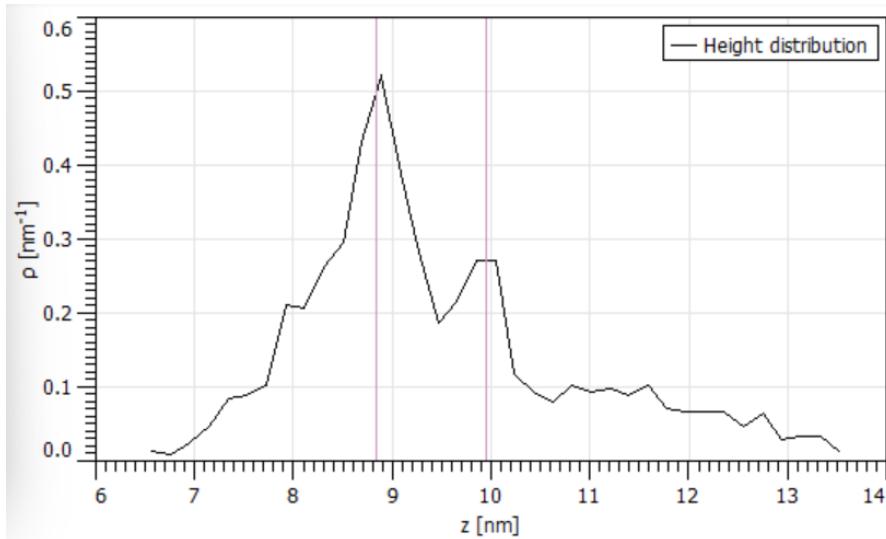


Abbildung 13: Die Höhenverteilung von Bereich (b) in Abbildung 11. Es sind zwei Höhen erkennbar, die viel häufiger vorkommen, die hier markiert werden.

Grafik entnommen aus Gwyddion.

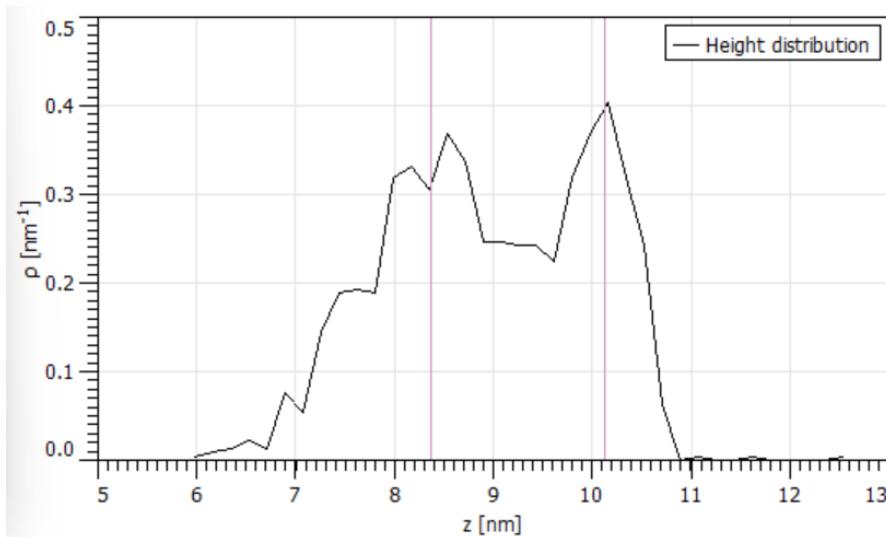


Abbildung 14: Die Höhenverteilung von Bereich (c) in Abbildung 11. Es sind zwei Höhen erkennbar, die viel häufiger vorkommen, die hier markiert werden. Grafik entnommen aus Gwyddion.

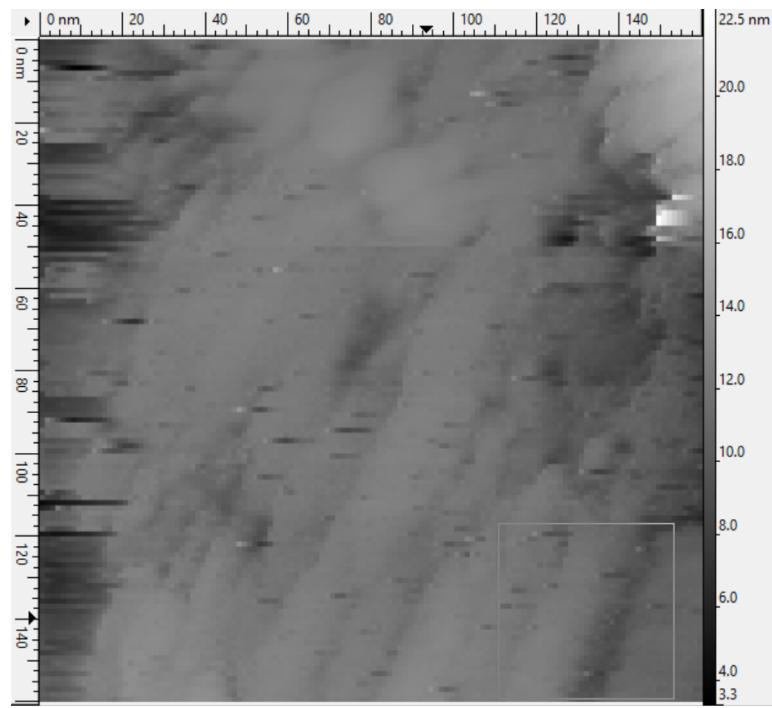


Abbildung 15: Der ausgewählte Bereich im zweiten Vorwärtsscan. Grafik entnommen aus Gwyddion.

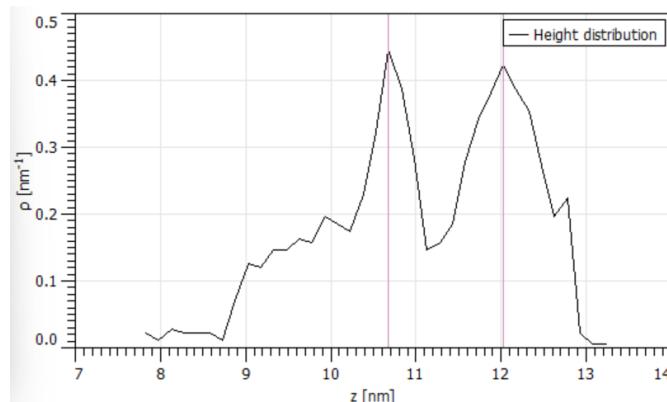


Abbildung 16: Die Höhenverteilung vom markierten Bereich in Abbildung 15. Es sind zwei Höhen erkennbar, die viel häufiger vorkommen, die hier markiert werden. Grafik entnommen aus Gwyddion.

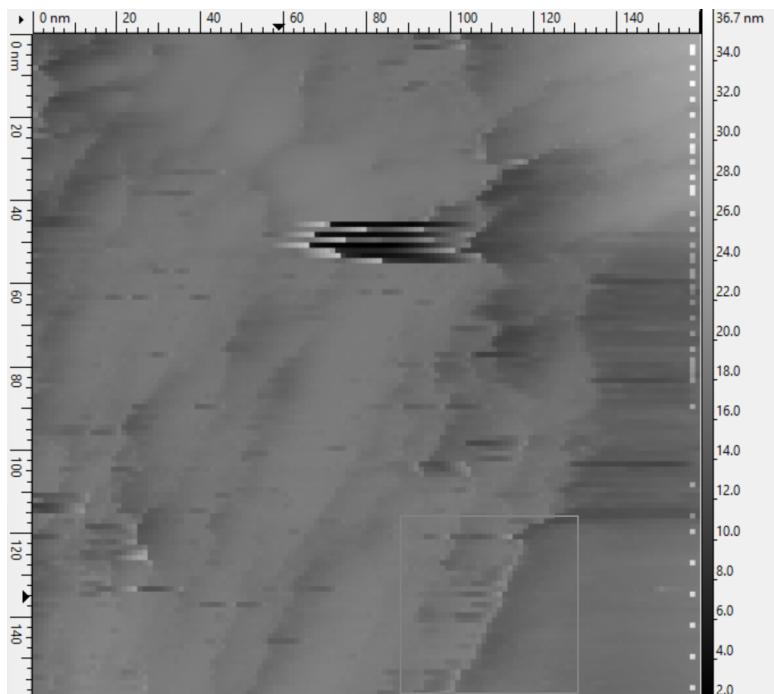


Abbildung 17: Der ausgewählte Bereich im zweiten Rückwärtsscan. Grafik entnommen aus Gwyddion.

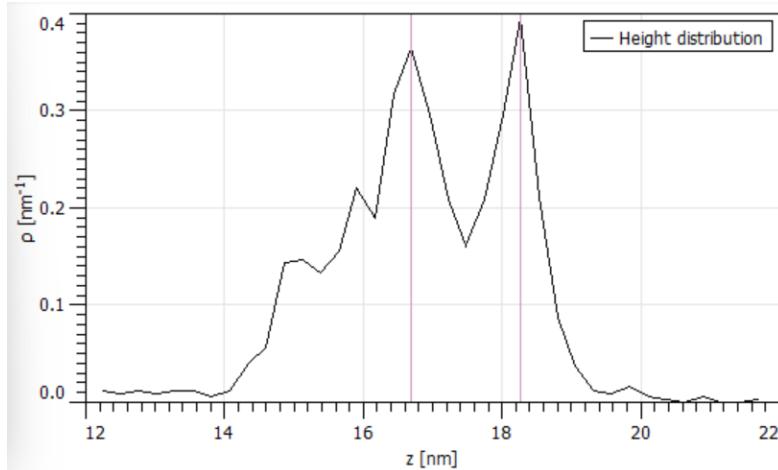


Abbildung 18: Die Höhenverteilung vom markierten Bereich in ???. Es sind zwei Höhen erkennbar, die viel häufiger vorkommen, die hier markiert werden. Grafik entnommen aus Gwyddion.

Die gemessenen Abstände zwischen den markierten Stellen in den Statistiken sind in Tabelle 1 dargestellt.

Tabelle 1: Die gemessenen Höhenunterschiede in den Messungen entnommen aus den Statistiken. Abbildung 12 hat zwei Höhen, da dort drei Peaks gemessen wurden.

Abbildungsnummer der Statistik	Höhe in nm
12	1,64; 1,63
13	1,11
17	1,76
16	1,35
18	1,58

Die mittlere Schichtdicke ergibt sich somit zu

$$d = (1,51 \pm 0,09) \text{ nm}.$$

5 Diskussion

6 Originaldaten

Literatur

- [1] Uni Bremen. *Graphen*. URL: <https://blogs.uni-bremen.de/scienceblog/2020/12/17/graphen-so-duenn-die-natur-es-nur-erlaubt/>.
- [2] Research Gate. *Structure and operation of the piezoelectric tube actuator*. URL: https://www.researchgate.net/figure/Structure-and-operation-of-the-piezoelectric-tube-actuator_fig4_326954694.
- [3] Charles R. Harris u. a. „Array programming with NumPy“. In: *Nature* 585.7825 (Sep. 2020), S. 357–362. DOI: 10.1038/s41586-020-2649-2. URL: <https://doi.org/10.1038/s41586-020-2649-2>.
- [4] John D. Hunter. „Matplotlib: A 2D Graphics Environment“. Version 1.4.3. In: *Computing in Science & Engineering* 9.3 (2007), S. 90–95. DOI: 10.1109/MCSE.2007.55. URL: <http://matplotlib.org/>. Current version 3.7.2, DOI: 10.5281/zenodo.8118151.
- [5] Eric O. Lebigot. *Uncertainties: a Python package for calculations with uncertainties*. Version 3.1.7. URL: <http://pythonhosted.org/uncertainties/>.
- [6] Temperatur Profis. *Temperaturregler Typen: PID-Regler*. URL: <https://temperaturprofis.de/temperaturregler/reglertypen-pid/>.
- [7] Repetico. *Toleranzanalyse*. URL: <https://www.repetico.de/card-32745091>.
- [8] Pauli Virtanen u. a. „SciPy 1.0: Fundamental Algorithms for Scientific Computing in Python“. In: *Nature Methods* 17 (2020), S. 261–272. DOI: 10.1038/s41592-019-0686-2.