

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 Proben	7
2.4.1 HOPG	7
2.4.2 Gold	10
3 Durchführung	10
4 Auswertung	12
4.1 HOPG	12
4.2 Gold	16
5 Diskussion	20
5.1 HOPG	20
5.2 Gold	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. Für die Goldprobe werden topographische Sprunghöhen aus mehreren Profilen extrahiert und ausgewertet.

2 Theorie

Die Rastertunnelmikroskopie basiert auf den Effekt der Tunnelströme, die im folgenden erklärt werden. Es wird auf den Aufbau und die Funktionsweise von Piezoröhren mit PID-Reglern eingegangen. Das nötige Hintergrundwissen für die zu vermessenden Proben HOPG und Gold wird gegeben.

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 Barriereförde 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 wird ein Elektron mit Energie E und Masse m in einer eindimensionalen Barriereregion mit konstanter effektiver Barriereförde Φ über der Fermienergie und Breite d betrachtet. Die zeitunabhängige Schrödingergleichung für die Wellenfunktion ψ in der Barriereregion lautet

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

\hbar ist das Planck'sche Wirkungsquantum. Für $E < \Phi$ ergibt sich ein reeller Dämpfungsparameter

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

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,

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

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

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

verwendet wird [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,

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

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 Besetzungsdifferenz 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 Spitzenposition \mathbf{r}_0 ist, folgt die gebräuchliche Näherung

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

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

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

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 [3].

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. Der Aufbau einer Piezoröhre ist in Abbildung 1 dargestellt. Anlegen einer elektrischen Spannung an die Elektroden erzeugt eine lokale Deformation der Rohrwand, die in geeigneter Kombination axiale Längenänderungen sowie Biege- und Torsionsanteile (X,Y-Richtungen) hervorruft. Im Rastertunnelmikroskop dient die Piezoröhre als Feinantrieb für die genaue Positionierung von Spitzenz bzw. Probe. Typische maximale Ausschläge liegen im Bereich weniger Nanometer aufgrund der exponentiellen Abhängigkeit des Tunnelstroms vom Abstand.

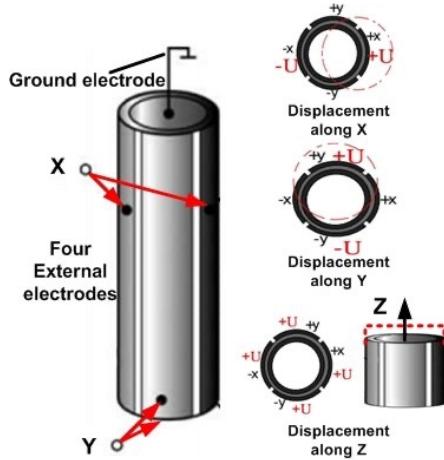


Abbildung 1: Aufbau und Funktionsweise des piezoelektrischen Rohraktuators [5].

Für kleine elektrische Felder lässt sich die axiale Längenänderung in linearer Näherung als

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

schreiben, 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, Creep, 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. Creep bezeichnet die zeitabhängige Nachbewegung nach einem Spannungssprung und verursacht langsamen Drift im Scanbild. Dieser Effekt ist besonders kritisch bei langsamem Linienraten oder beim Abtasten feiner Strukturen. Nichtlinearität und ver-

änderliche 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 Creep erheblich, sofern Sensorauflösung 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 Creep- 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 Spaltenartefakten 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 [9] [12].

Die Piezoröhren werden über sogenannte PID-Regler gesteuert. 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

$$u(t) = K_P e(t) + K_I \int_0^t e(\tau) d\tau + K_D \frac{de(t)}{dt}, \quad (1)$$

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

$$m\ddot{x} + c\dot{x} + kx = F_{\text{drive}}(t), \quad (2)$$

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 Creep 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-Creep 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 hochfrequente Messrauschen, sofern vor der Differentiation keine geeignete Filterung erfolgt. Beispielhafte Signalaufnahmen eines PID-Reglers sind in Abbildung 2 zu sehen [15].

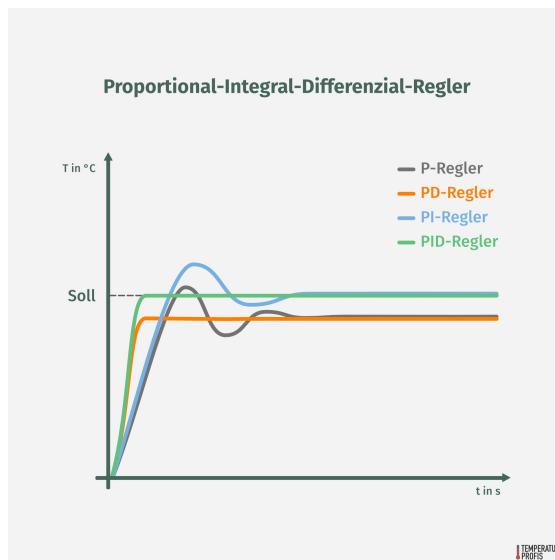


Abbildung 2: Vergleich der synchron aufgezeichneten Signale eines PID-Reglers [13].

2.4 Proben

2.4.1 HOPG

Bei Highly Ordered Pyrolytic Graphite, kurz HOPG, handelt es sich um ein Material, welches aus mehreren Graphenschichten, zu sehen in Abbildung 3, besteht, die in einer $a-b$ -Struktur zu einander stehen, dargestellt in Abbildung 4

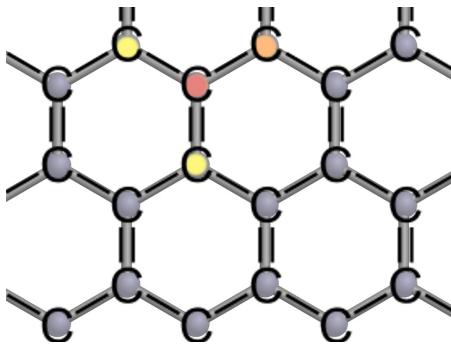


Abbildung 3: Schematische Darstellung der Gitterstruktur von Graphen [2].

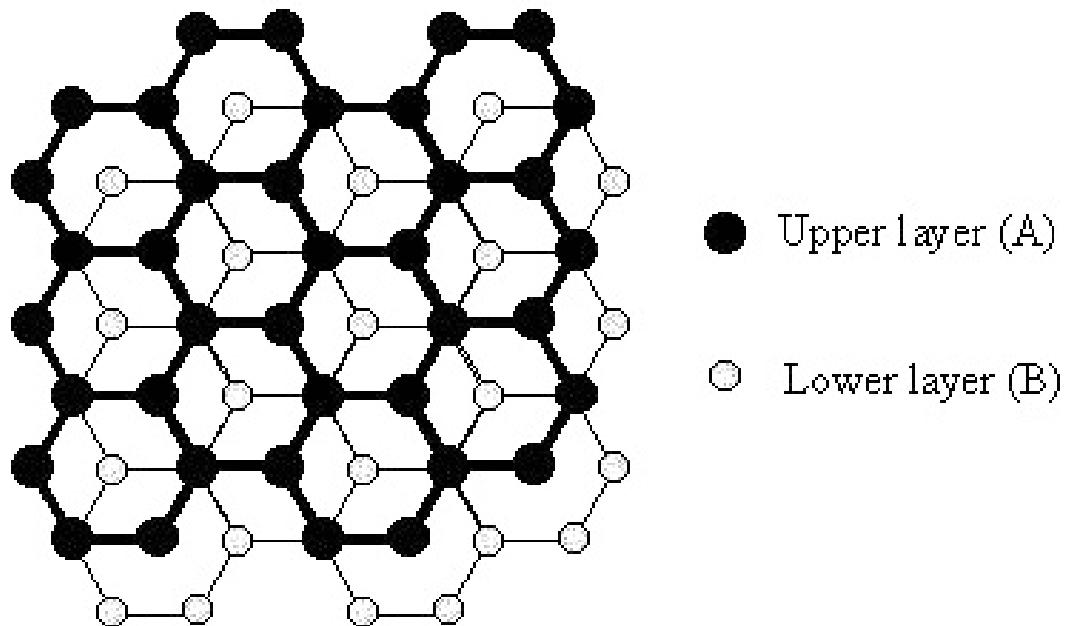


Abbildung 4: Schematischer Aufbau von HOPG. Der weiter oben liegende Layer ist schwarz, der darunter liegende Layer weiß. Aufgrund der *a-b*-Struktur der Schichten ist je ein Atom der zweiatomigen Basis direkt über einem anderen Atom einer darunter liegenden Basis [10].

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 $r \approx 0,246 \text{ nm}$, der nächste Nachbarabstand $r_{CC} \approx 0,142 \text{ nm}$. Aufgrund der Wechselwirkung übereinander liegender Kohlenstoffatome ändern sich die Zustandsdichten eben jener Atome, sodass unter einem Rastertunnelmikroskop nur jedes zweite Atom gemessen werden kann. Deshalb wird in diesem Versuch

der Abstand $r \approx 0,246 \text{ nm}$ vermessen.

Aufgrund der periodischen Struktur liegt es nahe, die reale Struktur über eine Fouriertransformation in den reziproken Raum zu übersetzen, schematisch dargestellt in Abbildung 5.

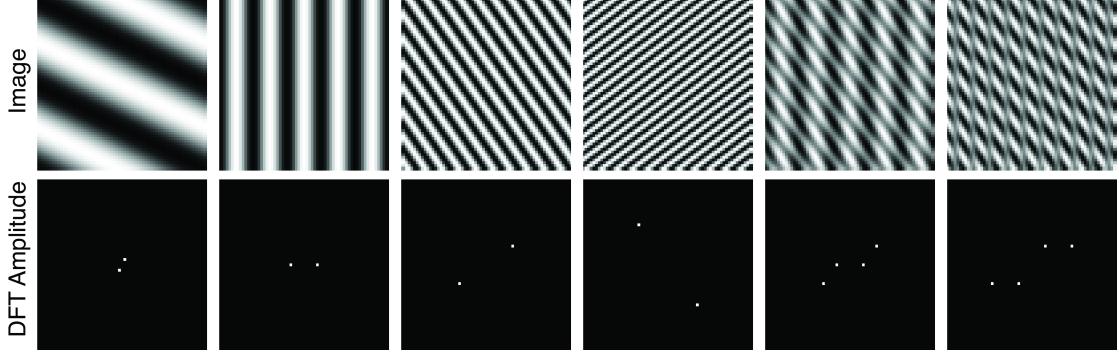


Abbildung 5: Sechs Bilder mit periodischen Mustern verschiedener Komplexität und ihre Übersetzung über eine Fouriertransformation in den reziproken Raum. Periodische Strukturen werden in Punkte übersetzt, die Periodizität in eine bestimmte Richtung darstellen [1].

In dieser Darstellung werden periodische Strukturen im realen Raum zu Punktpaaren im reziproken Raum, die vom Ursprung aus in Richtung der Periodizität liegen. Ihr Abstand enthält Informationen über die Frequenz der Periodizität. Diese Abstände im reziproken Raum und realen Raum stehen invers zu einander, was über die Definition des reziproken Gitters

$$b_i^* = \frac{2\pi}{V_E} (a_j \times a_k)$$

nachgerechnet werden kann. b_i^* ist ein reziproker Gittervektor, a_j und a_k sind reale Gittervektoren. Auch scheinbar komplexe Strukturen können so in wenige Punkte zerlegt werden. Für die Abstände im hexagonalen Gitter ergibt sich

$$|r| = \frac{4\pi i}{\sqrt{3}k}$$

für k in Radians pro Länge. Für k in Zyklen pro Länge wird ein Faktor von 2π eliminiert,

$$|r| = \frac{2}{\sqrt{3}k}. \quad (3)$$

[1] 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 zuordnbaren 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.

2.4.2 Gold

Gold kristallisiert im kubisch-flächenzentrierten (fcc) Gitter, dargestellt in Abbildung 6, mit der Gitterkonstante $a_0 \approx 0,408 \text{ nm}$.

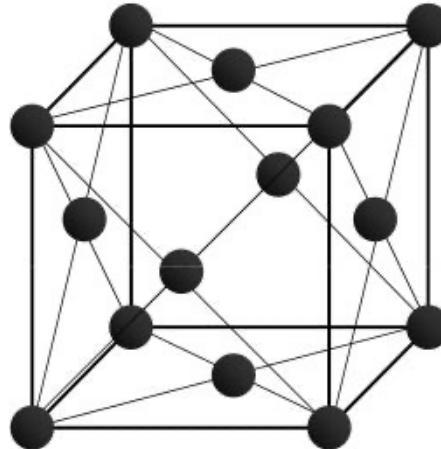


Abbildung 6: Aufbau eines fcc-Gitters [14].

Für die (111)-Ebene ergeben sich die charakteristischen Längenskalen

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

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.

3 Durchführung

Zu Beginn der Versuchsdurchführung wird für saubere Arbeitsbedingungen gesorgt und durchgehend fusselfreie Handschuhe getragen. 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 einem Platin-Iridium-Draht eine möglichst scharfe, idealerweise einatomige, ungefähr 1 cm lange 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 werden die elektrische Verbindung und die mechanische Klemmung überprüft, die Spitze vorsichtig eingesetzt und der Tip-Holder in das STM geschoben. Die Glasabdeckung wird geschlossen, sofern nicht an Anschlüssen gearbeitet wird. Die benutzten Gegenstände und der Aufbau des Mikroskops sind in Abbildung 7 dargestellt.



Abbildung 7: Der Versuchsaufbau inklusive eingebauter Probe.

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 Stelle von rechts wird darauf geachtet, empfindliche Hebel nicht zu berühren. Die Spitze wird später gerade und ohne Kippen herausgezogen, um mechanische Beschädigungen zu vermeiden. Es wird sichergestellt, dass keine offensichtlichen Störquellen vorhanden sind. Das verwendete Programm des Tunnelmikroskops ist **Nanosurf Naio**. Mit der **ADVANCE**-Funktion wird die grobe Annäherung gestartet und die Reflexion der Spitze auf der Probe als visuelle Abstandskontrolle beobachtet. Mit der **APPROACH**-Funktion wird die Probe selbstständig näher an die Nadel geführt, bis ein Tunnelstrom messbar ist.

Für HOPG werden zunächst Übersichtsaufnahmen mit großer Feldgröße aufgenommen, um die allgemeine Bildqualität und die Ebenheit der Probe zu bewerten. Das Ziel ist eine

glatte, nicht unbedingt flache Scanlinie zu erhalten. Falls diese starke Oszillationen oder Unebenheiten aufweist, wird eine neue Nadel präpariert. Anschließend werden schrittweise Vergrößerungen vorgenommen. Sobald der aufgenommene Bereich von 200 nm auf ungefähr 2,31 nm reduziert wird, ist die Struktur von HOPG erkennbar. Die Einstellungen des PID-Reglers werden variiert und so festgelegt, dass ein klares Bild entsteht. Die hier gewählten Größen betragen $P = 1000$, $I = 2000$ und $D = 0$. Es werden automatisch durchgehend Messungen durchgeführt und am Ende jene Bilder mit einer klaren Struktur für die Auswertung ausgewählt.

Für die Goldprobe erfolgt die Einstellung etwas grober, das Bild wird auf 160 nm gesetzt und analog Messungen durchgeführt. Hier wird darauf geachtet, Kontraste in der Höhe zu vermessen.

Nach Abschluss der Messungen wird der Scanner vollständig zurückgefahren und die Proben entnommen. Das Instrument wird abgedeckt und der Arbeitsbereich gereinigt.

4 Auswertung

Für die Auswertung wird die Python-Bibliothek `numpy` [6] benutzt. Mögliche Fits entstehen mit `curve_fit` aus `scipy.optimize`. [17]. Die Fehlerrechnung wird mit `uncertainties` [8] durchgeführt. Plots entstehen mit `matplotlib.pyplot` [7]. Bildbearbeitungen für das HOPG werden mit `skimage` durchgeführt. Die Auswertung der Goldprobe wird mit `Gwyddion` [11] 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 Gleichung 3 in die Abstände heller Spots im Realraum rücktransformiert. Für jedes Bild werden die entstandenen Abstände gemittelt.

Die Daten sind in Abbildung 8, 9, 10, 11, 12 links dargestellt, ihre Fouriertransformierten rechts.

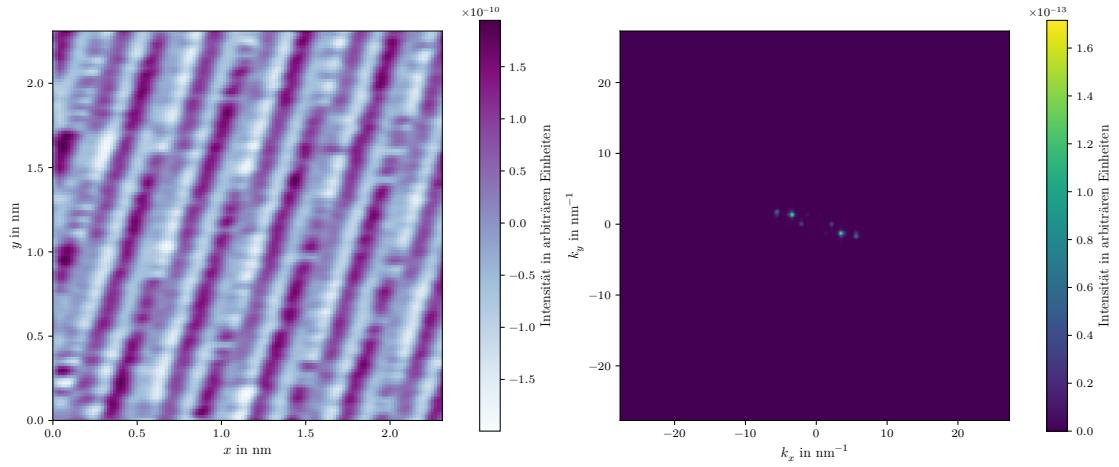


Abbildung 8: Aufgenommenes Realraum-Bild und die Fouriertransformierte. Erkennbar sind Probleme in der Aufnahme, aber eine Periodizität bleibt bestehen.

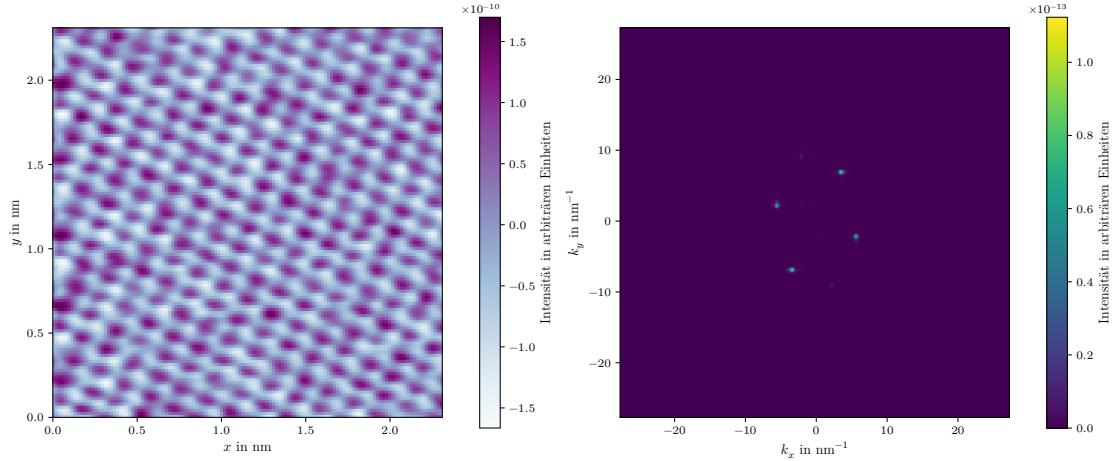


Abbildung 9: Aufgenommenes Realraum-Bild und die Fouriertransformierte. Die Fouriertransformation deutet auf eine sehr schwache Periodizität in einer der sechs Symmetrieeachsen.

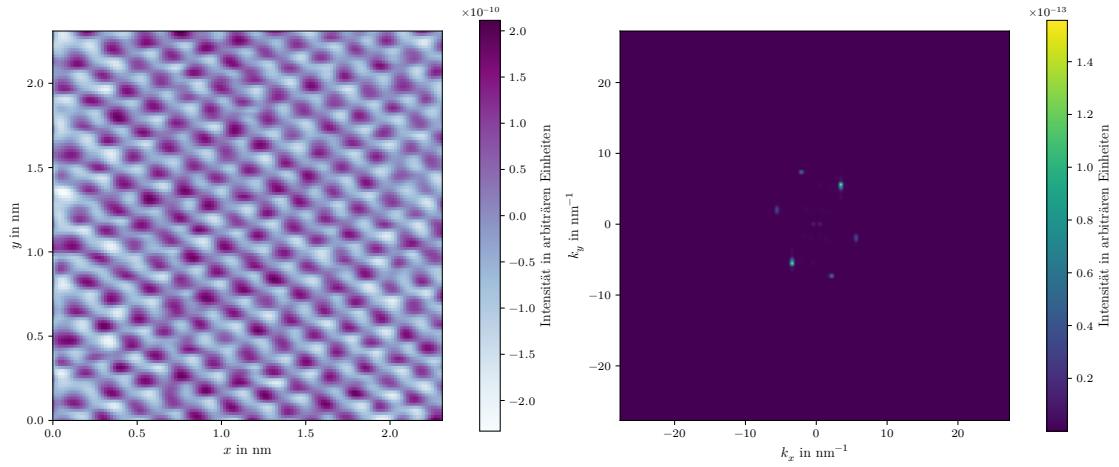


Abbildung 10: Aufgenommenes Realraum-Bild und die Fouriertransformierte.

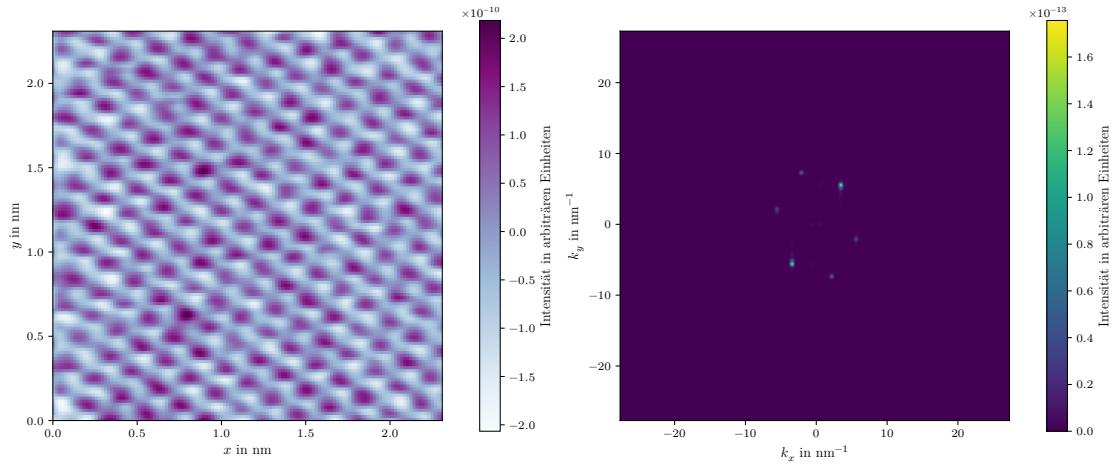


Abbildung 11: Aufgenommenes Realraum-Bild und die Fouriertransformierte.

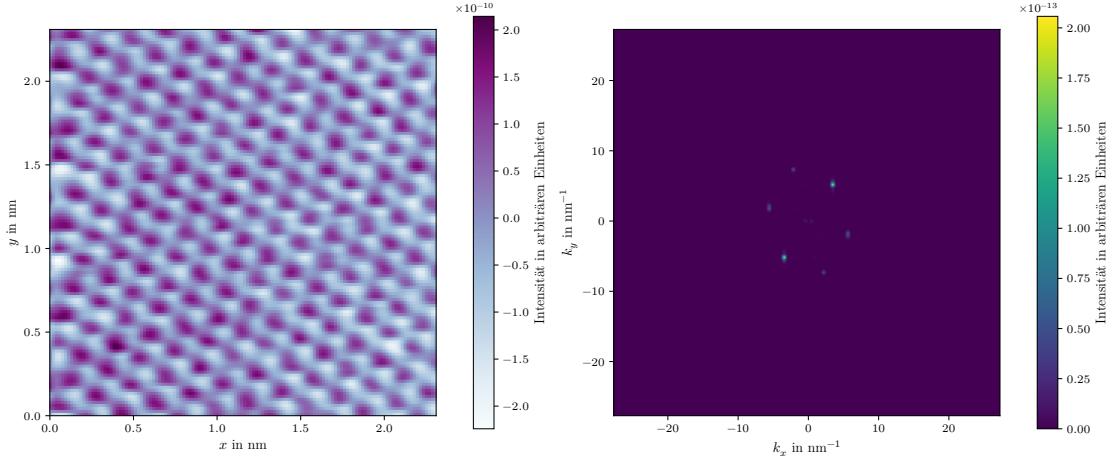


Abbildung 12: Aufgenommenes Realraum-Bild und die Fouriertransformierte.

Der Messung in Abbildung 8 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 9 zeigt in der Fouriertransformierten eine schwache Periodizität in einer der Symmetriearchsen 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 Gleichung 3, die Spots etwas flacher und breiter erscheinen. Des Weiteren sind in Abbildung 10, 11 und 12 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

$$\begin{aligned} r_1 &= (0,150 \pm 0,011) \text{ nm} \\ r_2 &= (0,171 \pm 0,007) \text{ nm} \\ r_3 &= (0,171 \pm 0,007) \text{ nm} \\ r_4 &= (0,175 \pm 0,008) \text{ nm} \end{aligned}$$

Was zu einer mittleren Gitterkonstanten von

$$\bar{r} = (0,166 \pm 0,005) \text{ nm}$$

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 13, 17 und 19, die entsprechenden Statistiken in Abbildung 14, 15, 16, 18 und 20 dargestellt.

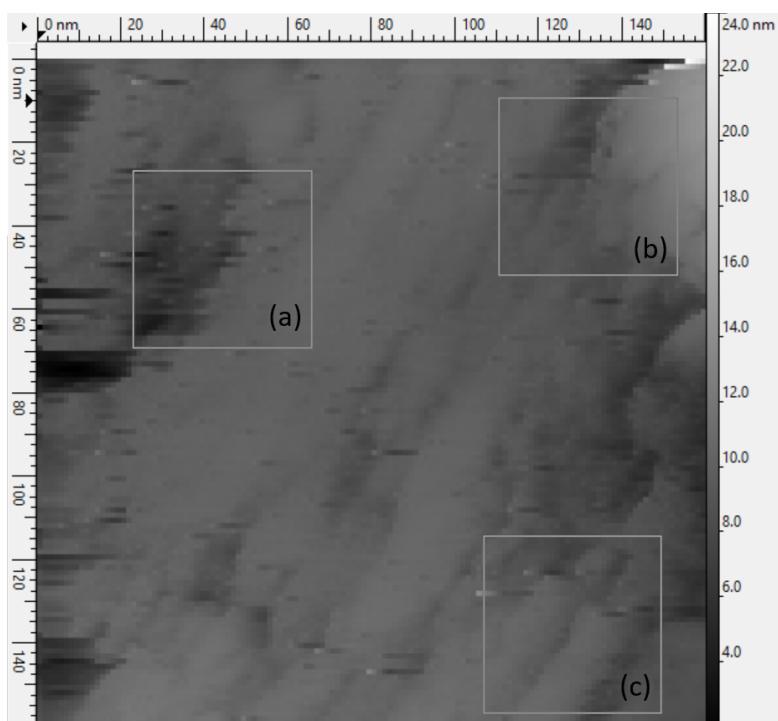


Abbildung 13: Die ausgewählten Bereiche des ersten Vorwärtsscans, betitelt (a), (b) und (c). Es sind Kontraste erkennbar. Grafik entnommen aus **Gwyddion**.

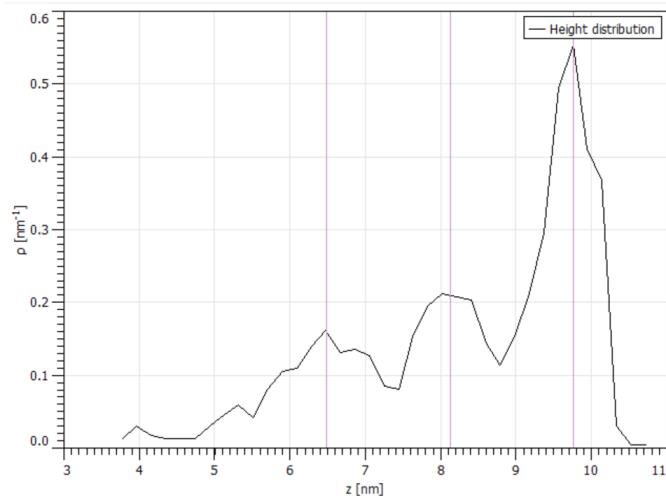


Abbildung 14: Die Höhenverteilung von Bereich (a) in Abbildung 13. Es sind drei äquidistante Höhen erkennbar, die viel häufiger vorkommen, die hier markiert werden. Grafik entnommen aus [Gwyddion](#).

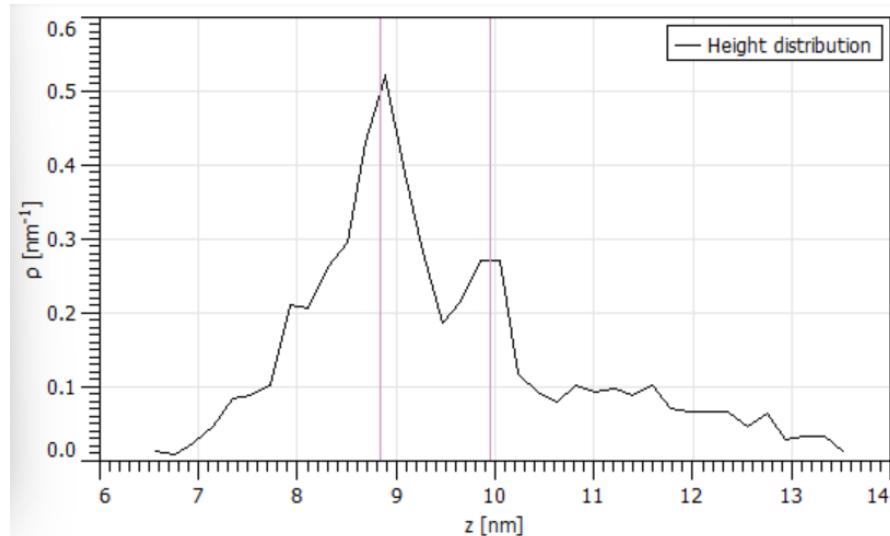


Abbildung 15: Die Höhenverteilung von Bereich (b) in Abbildung 13. Es sind zwei Höhen erkennbar, die viel häufiger vorkommen, die hier markiert werden.

Grafik entnommen aus [Gwyddion](#).

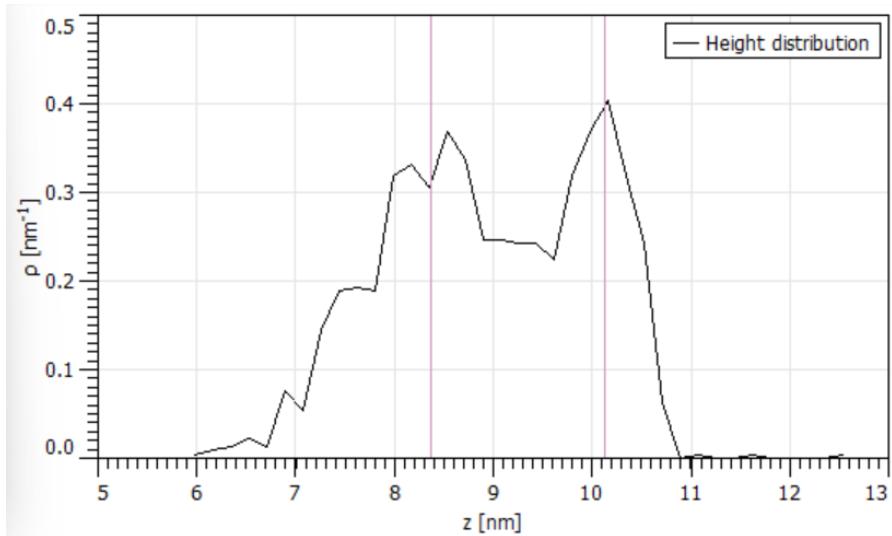


Abbildung 16: Die Höhenverteilung von Bereich (c) in Abbildung 13. Es sind zwei Höhen erkennbar, die viel häufiger vorkommen, die hier markiert werden. Grafik entnommen aus Gwyddion.

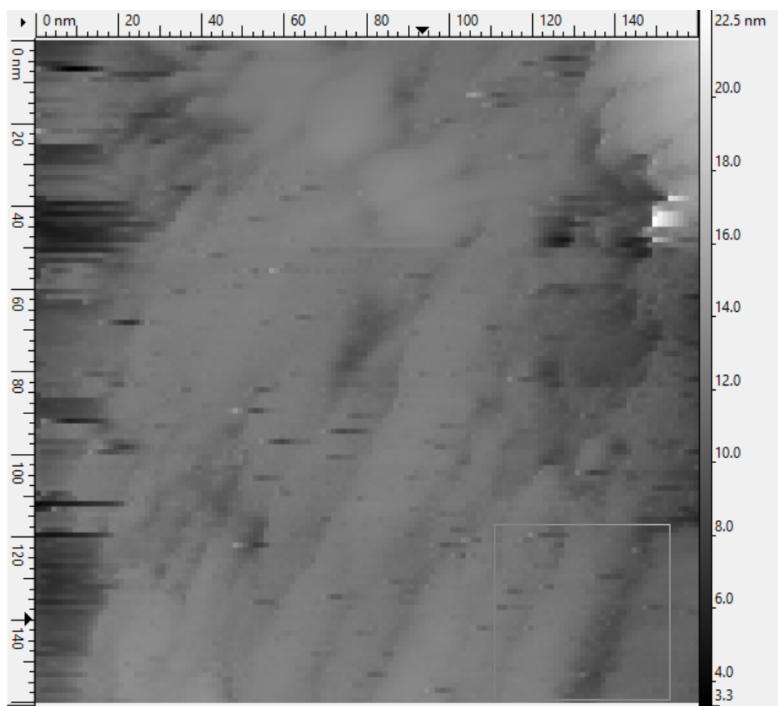


Abbildung 17: Der ausgewählte Bereich im zweiten Vorwärtsscan. Grafik entnommen aus Gwyddion.

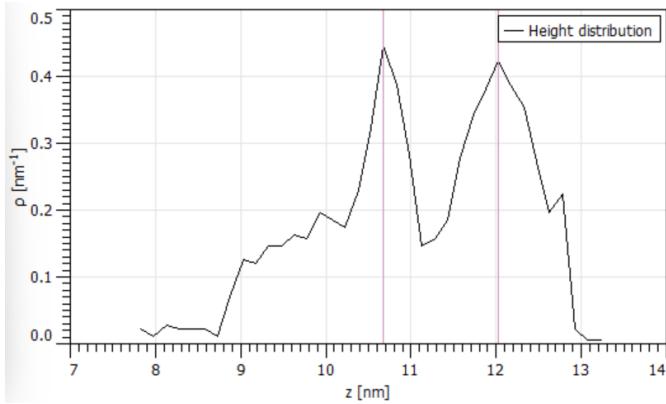


Abbildung 18: Die Höhenverteilung vom markierten Bereich in Abbildung 17. Es sind zwei Höhen erkennbar, die viel häufiger vorkommen, die hier markiert werden. Grafik entnommen aus Gwyddion.

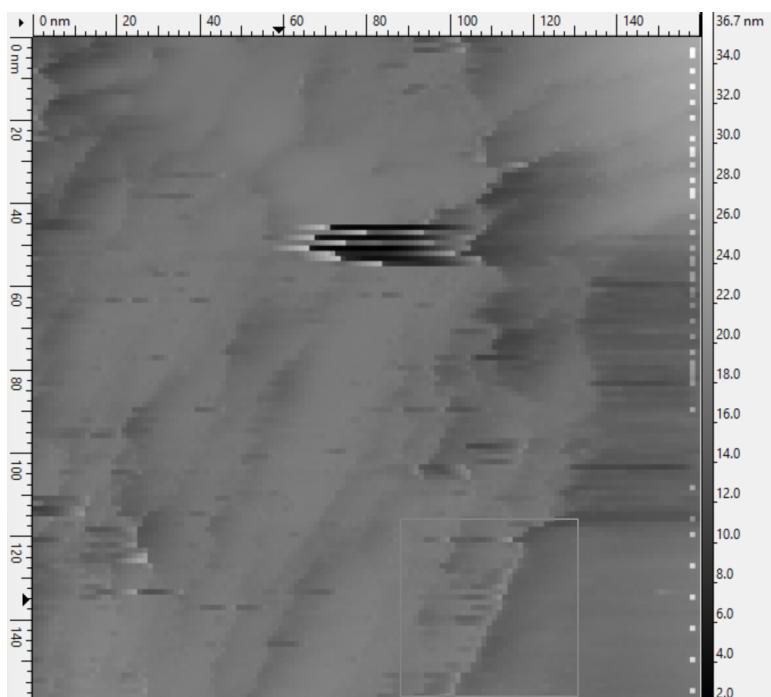


Abbildung 19: Der ausgewählte Bereich im zweiten Rückwärtsscan. Grafik entnommen aus Gwyddion.

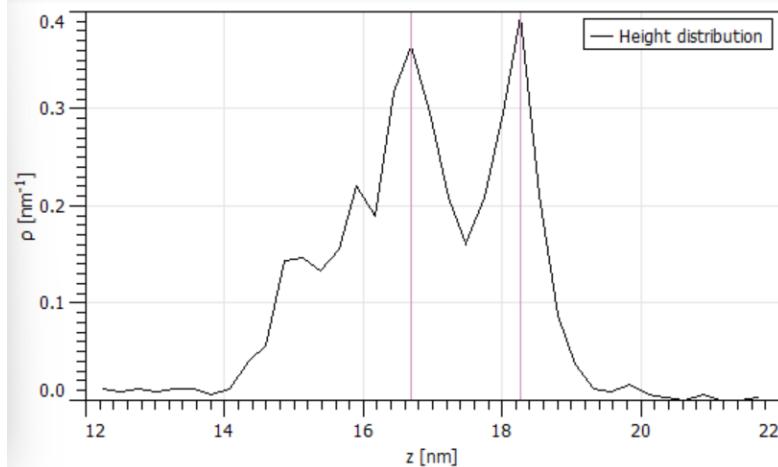


Abbildung 20: Die Höhenverteilung vom markierten Bereich in Abbildung 19. Es sind zwei Höhen erkennbar, die viel häufiger vorkommen, die hier markiert werden. Grafik entnommen aus Gwyddion.

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 14 hat zwei Höhen, da dort drei Peaks gemessen wurden.

Abbildungsnummer der Statistik	Höhe in nm
14	1,64; 1,63
15	1,11
16	1,76
18	1,35
20	1,58

Die mittlere Schichtdicke ergibt sich somit zu

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

5 Diskussion

5.1 HOPG

Die berechneten Gitterkonstanten weisen keine große Streuung auf, weichen aber stark vom Literaturwert von 0,246 nm ab. Diese Abweichung beträgt 32,3 %.

Bessere Ergebnisse könnten mit sauberer präparierten Nadeln erhalten werden. Wie in Abbildung 8 zu sehen ist, waren die hier durchgeführten Scans nicht perfekt. Eine weitere

Fehlerquelle ist eine systematische Verzerrung des Scanbildes. In den Fouriertransformationen ist erkennbar, dass die gemessenen Abstände eher flach und breit sind als regelmäßigt. Eine Ursache dafür könnte ein nicht perfektes Alignment der Messspitze auf der Probe sein.

5.2 Gold

Die berechnete Schichtdicke beträgt $(1,51 \pm 0,09)$ nm. Ein Goldatom hat einen Radius von ungefähr 0,144 nm [16], also einen Durchmesser von 0,288 nm [16]. Dies deutet darauf hin, dass hier nicht einzelne, ein Atom dicke Schichten vermessen wurden, sondern konsistent ungefähr fünf Atome dicke Schichten. Da tendenziell Stellen aus der Messung genommen wurden, an denen ein Kontrast optisch erkennbar war, könnte die mehratomige Schichtdicke dadurch erklärt werden. Eine einatomige Lage hätte einen viel schwächeren Kontrast.

Die Berechnung der Schichtdicke könnte durch bessere Statistik genauer werden. Allerdings decken größere Flächen, die ausgewertet werden, auch mehr mögliche Höhen ab. Das erschwert die Auswertung der Statistik. Eine Alternative ist, kleinere Bilder aufzunehmen und somit zu versuchen, die Streuung der Höhen zu verringern, sodass schwache Kontraste von einatomigen Schichten nicht unterdrückt werden von starken Kontrasten.

Literatur

- [1] W. Freeman A. Torralba P. Isola. *16 Fourier Analysis*. URL: https://visionbook.mit.edu/image_processing_fourier.html.
- [2] Uni Bremen. *Graphen*. URL: <https://blogs.uni-bremen.de/scienceblog/2020/12/17/graphen-so-duenn-die-natur-es-nur-erlaubt/>.
- [3] Clementine Carbillot. „Chapter 3. Experimental setups“. URL: https://qs.lpem.espci.fr/sites/qs.lpem.espci.fr/IMG/pdf/stmsts_method.pdf.
- [4] Paul Davies. *2.6. Particle in a box with finite-potential walls*. URL: https://www-users.york.ac.uk/~pjdl13/notebooks/2_6_particle_in_a_finite_potential_box.html.
- [5] 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.
- [6] 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>.
- [7] 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.
- [8] Eric O. Lebigot. *Uncertainties: a Python package for calculations with uncertainties*. Version 3.1.7. URL: <http://pythonhosted.org/uncertainties/>.

- [9] H. Lüth. *Surfaces and Interfaces of Solids*. Springer Series, 1993.
- [10] Micro to Nano. *HPG Substrate - Highly Ordered Pyrolytic Graphite für AFM/SPM/STM*. URL: <https://www.microtonano.com/de/HOPG-highly-ordered-pyrolytic-graphite-Substrat-fuer-AFM-SPM-STM.php>.
- [11] David Nečas und Petr Klapetek. „Gwyddion: an open-source software for SPM data analysis“. In: *Central European Journal of Physics* 10 (1 2012), S. 181–188. ISSN: 1895-1082. DOI: 10.2478/s11534-011-0096-2.
- [12] physikinstrumente. *Piezokeramische Rohre*. URL: <https://www.physikinstrumente.de/de/produkte/piezoelektrische-wandler-transducer-piezoaktoren/rohre>.
- [13] Temperatur Profis. *Temperaturregler Typen: PID-Regler*. URL: <https://temperaturprofis.de/temperaturregler/reglertypen-pid/>.
- [14] Repetico. *Toleranzanalyse*. URL: <https://www.repetico.de/card-32745091>.
- [15] Grant Maloy Smith. *Was ist ein PID-Regler?* URL: <https://dewesoft.com/de/blog/was-ist-ein-pid-regler>.
- [16] Fachbereich 05 Universität Bremen Lagerstättenkundliche Sammlung. *I. Elemente*. URL: <https://www.geo.uni-bremen.de/projektarbeiten/Lucy-Schlicht/elemente.html>.
- [17] 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.