

## **422: Rastertunnelmikroskopie**

Leonie Dessau & Lena Beckmann

1.-2.12.2025

# 1 Einleitung

## 1.1 Versuchsziel

Rastertunnelmikroskopie ist eine wichtige Methode, um Strukturen zu untersuchen, die mit klassischen optischen Mikroskopen nicht aufgelöst werden können. Auch eine atomare Skala der Auflösung ist dabei erreichbar [4, S. 2]. In dem Versuch wird ein Rastertunnelmikroskop (RTM) genutzt, um die Oberflächentopologie und damit die Kristallstruktur von auf Saphir oder Silizium aufgedampften Goldkugelchen und anschließend von hochgeordneten pyrolytischem Graphit (HOPG) zu untersuchen und letzteres auch auf atomarer Skala aufzulösen [4, S. 1]. Außerdem wird auch die Oberflächenstruktur von Molybdändisulfid ( $\text{MoS}_2$ ) mit dem RTM untersucht.

## 1.2 Funktionsweise eines RTM

Rastertunnelmikroskopie nutzt das Phänomen des messbaren, ortsabhängigen Elektronenstroms (Tunnelstrom) zwischen einer elektrisch leitfähigen Oberfläche einer Probe und einer feiner Metallspitze, wenn diese in einem kleinen Abstand  $z$  über die Oberfläche bewegt wird. Dabei wird die Bewegung der Spitze über die Probe als fein über Piezokristalle gesteuerte Rasterbewegung in der x-y-Ebene vorgenommen und die Höhe  $z > 0$  und der Tunnelstrom  $I$  für jeden Rasterpunkt (Pixel des entstehenden Bildes) gemessen. So können Strukturen der Probenoberfläche untersucht werden.

### 1.2.1 Tunnelstrom

Bei klassischer Betrachtung wird überhaupt kein Tunnelstrom erwartet, da Elektronen aus leitfähigen Materialien, mit Energien unterhalb des Betrags einer Potentialbarriere  $E < V$  sich niemals innerhalb oder hinter der Barriere aufhalten können. In der quantenmechanischen Betrachtung von Elektronen als Wellenfunktion gibt es jedoch eine nichtverschwindende Wahrscheinlichkeit, dass sich ein Elektron auch im Bereich der Barriere oder dahinter aufhält. Bei quantenmechanischer Betrachtung können Teilchen durch Potentialbar-

rieren Tunneln, die bei klassischer Betrachtung das Teilchen stoppen sollten. [3, S. 707–709]

Bei klassischer Betrachtung wird überhaupt kein Tunnelstrom erwartet, da Elektronen aus leitfähigen Materialien, mit Energien unterhalb des Betrags einer Potentialbarriere  $E < V$  sich niemals innerhalb oder hinter der Barriere aufhalten können. In der quantenmechanischen Betrachtung von Elektronen als Wellenfunktion gibt es jedoch eine nichtverschwindende Wahrscheinlichkeit, dass sich ein Elektron auch im Bereich der Barriere oder dahinter aufhält.

Der resultierende Tunnelstrom ist hängt exponentiell vom Abstand ab und ist sehr empfindlich bei Änderungen in den Größenordnungen weniger Angström. Es gilt die folgende Proportionalität [2]:

$$I \propto U_T \exp(-A\Phi^{1/2}z) \quad (1.1)$$

Wobei  $z$  der Abstand von Spalte zu Probe darstellt. [geschlossene form für Strom. ggf gerthsen S.708/709]

### 1.2.2 Piezoeffekt

Der Piezoeffekt beschreibt den Zusammenhang zwischen elektrischer Spannung und Verformung von Materialien mit polaren Achsen. Dieser Zusammenhang ist näherungsweise linear;

$$\Delta x = \delta U \quad (1.2)$$

Dieser Effekt ist in der Größenordnung von  $10^{-11}$ – $10^{-9}\text{ m V}^{-1}$  und erlaubt somit relativ einfach Positionsregelung auf atomaren Größenskalen. [3, S. 339–341]

### 1.2.3 Regelkreis

Der Abstand der Spalte über der Probe muss geregelt werden, damit der Abstand stets klein genug ist, damit ein messbarer Tunnelstrom fließt ohne jedoch die Probe zu berühren und so potentiell die Spalte zu zerstören.

Zu diesem Zweck wird eine PID-Schleife verwendet. Dies ist eine in der Regelungstechnik übliche Art, ein System zu regeln, so dass es sich möglichst effizient einem Sollpunkt annähert. [cite]

[macht es Sinn hier die Standardform der PID Regelgleichung hinzupacken und zu erläutern??]

Wird der Proportionalfaktor auf Null gesetzt und die Integrationszeit sehr lang gewählt, folgt die Spitze nur noch der generellen Tendenz oder Schieflage der Oberfläche, nicht mehr aber Unebenheiten. Dies entspricht dem Wechsel vom konstanten Strom Modus (CCM) zum konstanten Höhen Modus (CHM). [4]

## 2 Highly Ordered Pyrolytic Graphite (HOPG)

Highly ordered Pyrolytic Graphite (HOPG) ist ein Kristall, bestehend aus Schichten von jeweils hexagonal angeordneten Kohlenstoffatomen. Die Schichten sind zueinander verschoben, so dass jeweils die Hälfte der Kohlenstoffatome über solchen aus der nächsten Lage liegen und die andere Hälfte über entsprechenden Hohlstellen. Dies ist skizziert in Abbildung [abbildung] [cite].

Die Schichten zueinander sind nur schwach über Van-der-Vaals Kräfte gebunden, innerhalb der Brücken sind die Kohlenstoffatome kovalent, also deutlich stärker gebunden [cite]. Dies wird beim Vorbereiten der Probe ausgenutzt, da es erlaubt, ganze schichten relativ leicht abzulösen während diese in sich in Takt bleiben.

Die Verschiebung der Schichten zueinander führt dazu, dass jedes zweite Elektron an die darunterliegende Schicht gebunden ist, während die übrigen keine Bindung zu dieser haben. Dies führt durch verschobene Elektronenorbitale, der an die untere Schicht gebundenen Elektronen, dafür, dass diese Elektronen weit weniger messbar sind. In Folge dessen wird mit dem STM nur jedes zweite Elektron gemessen. Diese haben dann theoretisch einen Abstand von  $d = 0,246 \text{ nm}$  und bilden gleichseitige Dreiecke [4].

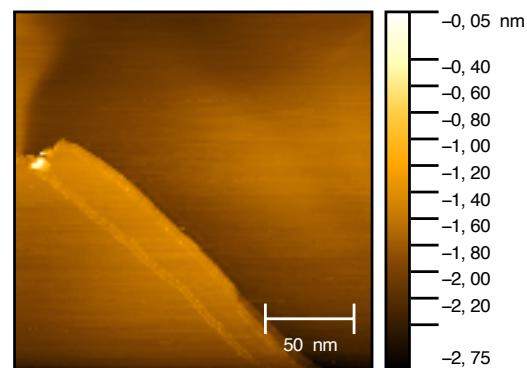


Abbildung 2.1: Übersichtsaufnahme der Graphoberfläche im konstanten Strom Modus [scanspeed]

In der unteren linken Hälfte der Aufnahme 2.1 fand sich eine Stufe, ansonsten wird die Oberfläche als eben identifiziert. Es wird im weiteren ein Ausschnitt in der rechten oberen Hälfte von Abbildung 2.1 genutzt. Schrittweise wird der Ausschnitt verkleinert und im CCM die Glätte des Ausschnitts verifiziert. Bei einer Größe von  $4 \text{ nm} \times 4 \text{ nm}$  wird anschließend auf den konstanten Höhen Modus (CHM) gewechselt, in dem die Konstante P auf 0 und I auf 4 gesetzt werden.

Nun werden Aufnahmen mit atomarer Auflösung hergestellt (siehe ??).

### 2.1 Durchführung

Die HOPG Probe wird zunächst unter dem USB Mikroskop dokumentiert (siehe ??) [bild mit Skala]

Anschließend wird die Probe vorbereitet in dem ein Stück Tesa Film auf die Probe geklebt und dann abgezogen wurde. Dies sorgt dafür, dass eine Frische, unverschmutzte Graphitschicht freigelegt wird. Es wird zunächst im CCM ein  $200 \text{ nm} \times 200 \text{ nm}$  STM Bild 2.1 aufgenommen und eine geeignete Fläche Stelle gesucht.

### 2.2 Auswertung

In den Aufnahmen erwarten wir gemäß [reference graphic], ein Muster gleichseitigen Dreiecken mit Seitenlänge  $0,246 \text{ nm}$ . Eine gelungene Aufnahme wird nun genutzt um dort den Abstand mehrerer Maxima zueinander zu vermessen. Hierzu wurde die Mess-Funktionalität von gwyddion [cite] verwendet.

Index	$\varphi/^\circ$	Länge $L/\text{pm}$
1	$161,1 \pm 0,5$	$1236,0 \pm 0,5$
2	$161,8 \pm 0,5$	$1261,7 \pm 0,5$
6	$160,3 \pm 0,5$	$1257,3 \pm 0,5$
3	$39,5 \pm 0,5$	$1256,8 \pm 0,5$
4	$40,2 \pm 0,5$	$1260,6 \pm 0,5$
5	$39,4 \pm 0,5$	$1293,7 \pm 0,5$

Tabelle 2.1: Längen und Winkel relativ zur horizontalen der in 2.2 markierten Linien. Die Unsicherheiten ergeben sich aus der Ausdehnung der Maxima.

Die elektronische Struktur von HOPG ließ sich visuell gut darstellen. Die erwarteten Atomabstände konnten nicht exakt gefunden werden, wobei in beide Richtungen Abweichungen um wenige Prozent über dem Erwartungswert. Dies deutet auf eine leichte Fehlkalibration des STM hin, beispielsweise hervorgerufen durch Hysterese oder thermische Dekalibration der Piezoelemente. [mehr labern; maybe thermische expansion vom hopg] [labern über winkel. gut aber bla]

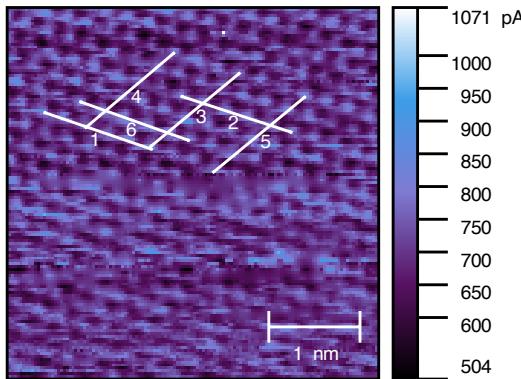


Abbildung 2.2: [scanspeed]

Zum besseren Mitteln wurde jeweils der Abstand von fünf Maxima bestimmt. Außerdem werden die Winkel der Linien in denen die Maxima liegen vermessen.

Die Werte in Tabelle 2.1 lassen sich in zwei Gruppen aufspalten, die den zwei Richtungen entsprechen, in denen die Kohlenstoffatome in Reihen liegen. Für jede Richtung wird jetzt der Mittelwert des Abstands zwischen je zwei Maxima berechnet, die Unsicherheit wird mittels Gaußscher Fehlerfortpflanzung berechnet[3, S. 8–9]. Es ergibt sich für die erste Richtung (repräsentiert durch die Linien 1, 2, 6) ein Mittlerer Winkel von  $\varphi_1 = (161,1 \pm 0,3)^\circ$  und ein Abstand von  $L_1 = (250,3 \pm 0,1) \text{ pm}$ . Die selben Berechnungen für die zweite Gruppe (aus Linie 3, 4 und 5) ergeben  $\varphi_2 = (39,7 \pm 0,3)^\circ$  und  $L_2 = (254,1 \pm 0,1) \text{ pm}$ . Die beiden Abstände  $L_1$  und  $L_2$  liegen jeweils einige pm über dem Erwartungswert. Hierbei liegt  $L_1$  um 1.7% und  $L_2$  um 3.3% vom Erwartungswert ab. Der Winkelunterschied ist mit  $\Delta\varphi = |\varphi_2 - \varphi_1| = (121,4 \pm 0,4)^\circ$  bis auf ein Grad an dem erwarteten Winkel von  $120^\circ$  und weicht um weniger als 1% von dem erwarteten Wert ab.

### **3 MoS<sub>2</sub>**

Zuletzt wird noch eine MoS<sub>2</sub> Probe untersucht. Molybdän-Sulfid (MoS<sub>2</sub>) ist eine Kristallstruktur aus Molybdän und Schwefel, welche ähnlich wie HOPG eine schichtartige Struktur, bei welcher die einzelnen Schichten nur durch Van-der-Vaals Kräfte zusammengehalten werden. Hierbei sind an der Oberfläche Schwefelatome mit einem Abstand von  $d = 1 \text{ nm}$  die dominant messbare Struktur [1].

## Literatur

- [1] R. Coehoorn u.a. “Electronic structure of MoSe<sub>2</sub>, MoS<sub>2</sub>, and WSe<sub>2</sub>. I. Band-structure calculations and photoelectron spectroscopy”. In: *Phys. Rev. B* 35 (12 Apr. 1987), S. 6195–6202. DOI: 10.1103/PhysRevB.35.6195. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.35.6195>.
- [2] H. Rohrer G. Binnig. “Scanning tunneling microscopy”. In: *Surface Science* 126.1 (1983), S. 236–244. DOI: [https://doi.org/10.1016/0039-6028\(83\)90716-1](https://doi.org/10.1016/0039-6028(83)90716-1).
- [3] Christian Gerthsen und Dieter Meschede. *Gerthsen Physik*. Springer, 2013. DOI: 10.1007/978-3-662-45977-5.
- [4] *Versuchsbeschreibung P422: Rastertunnelmikroskopie*. Physikalisches Institut, Universität Bonn. URL: <https://uni-bonn.sciebo.de/s/0FYPwvfOVjkYhBE> (besucht am 04.12.2025).