

## **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 [9, 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 [9, 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. [6, 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 [5]:

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

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. [6, 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). [9]

## 2 Untersuchung von Gold im RTM

Um die Funktionsweise des RTM im Bereich größer der atomaren Auflösung von Graphit-Gittern zu überprüfen, wird zunächst die Oberflächentopologie einer mit Gold bedampften Silizium- oder Saphir-Probe untersucht. Welche der beiden Probenarten untersucht wurde, kann anhand des erhaltenen RTM-Bilds erschlossen werden, die Proben waren jedoch nicht beschriftet. Es werden die beiden Goldproben (Probe 1: Nummer 16, Probe 2: Nummer 14) nacheinander mit dem RTF untersucht.

### 2.1 Theoretische Überlegungen

Es wird nicht direkt Gold untersucht, welches aufgrund seiner elektrisch relativ flachen kristallinen Struktur isoliert zu nur wenige kontrastreichen Aufnahmen führen würde [2, S. 59–60]. Stattdessen werden Proben von Silizium bzw. Saphir verwendet, auf welche Gold aufgedampft wurde [9, S. 13].

Auf der glatten Si- oder Saphir-Oberfläche sind so kleine Goldkugelchen ohne festes Muster angeordnet. Sie sollten so bei supra-atomaren Auflösungen des Mikroskops gut sichtbar sein. Eine atomare Auflösung ist bei diesen Proben auch nicht sinnvoll, da Gold, wie genannt, sehr gleichmäßige Elektronenverteilungen aufweist und so keine deutlichen Strukturen innerhalb des Kristallgitters erkennbar sein würden. Durch den Erhitzungsprozess kann allerdings damit gerechnet werden, dass die Goldkugelchen in ihrer Oberfläche stufenförmige Strukturen aufweisen anstatt vollständig glatt zu sein, allerdings ist die Ausprägung der Stufen stark von der erreichten Temperatur während des Erhitzens abhängig [2, S. 59]. Außerdem ist zu beachten, dass die vermessenen Proben [\[hier noch weitere Ausführung\]](#)

### 2.2 Durchführung

#### 2.2.1 Verwendete RTM-Spitze und Proben

Zunächst werden die beiden Goldproben sowie die verwendete Spitze mit dem USB-Mikroskop dokumentiert. Durch letzteres kann zwar keine quantitative Einschätzung der Qualität der Spitze liefern (dafür müsste das Mikroskop atomare Auflösung haben, da dies die ideale Dicke der Spitze ist), kann aber einen guten Anhaltspunkt liefern, ob der Reißvorgang bei der Spaltenpräparation wie erwünscht eine schräge Kante, bei der eine spitzere Spitze wahrscheinlicher ist, entstanden ist oder ob der Draht planar und eher stumpf abgerissen wurde. Im Versuchsdurchlauf wurden zunächst mehrere Spitzen ausprobiert, gute RTM-Aufnahmen lieferte jedoch nur eine der Spitzen, die in Abb. 2.1 in einer USB-Mikroskop-Aufnahme abgebildet ist.



Abbildung 2.1: USB-Mikroskopaufnahme der für die RTM-Aufnahmen genutzten Spalte. Der eingezeichnete Maßstab ergibt sich aus dem Durchmesser des genutzten Platin-Iridium-Draht von  $r = 0,3 \text{ mm}$  [9, S. 8]. Zum Einfügen des Maßstabs wurde das Bildbearbeitungsprogramm GIMP [7] genutzt.

Um die USB-Mikroskopaufnahmen der ersten Goldprobe mit einer Skala versehen zu können, wurde jeweils ein Kalibrationsnetzchen mit bekannten Dimensionen in der gleichen Brennebene wie die Aufnahmen der Probe aufgenommen. Aus der so berechenbaren Bildskala kann eine Skala für die Probenaufnahme bestimmt werden.

Analog wird im Folgenden auch für die USB-Mikroskopaufnahmen der weiteren Proben (zweite Goldprobe, HOPG, MoS<sub>2</sub>), jeweils mit individuellen Kalibrationsaufnahmen des Netzchens, vorgenommen.

Das Kalibrationsnetz besitzt ein Netz aus Divisionen der Größe 1Inch/100 in vertikaler Richtung und 1Inch/400 in horizontaler Richtung, siehe Abbildung 2.2. Aus der Entsprechung 1Inch = 25,4 mm[1, S. 11] ergibt sich die Abmessung

#### [Kalibration Goldprobe 1 mit Netz]

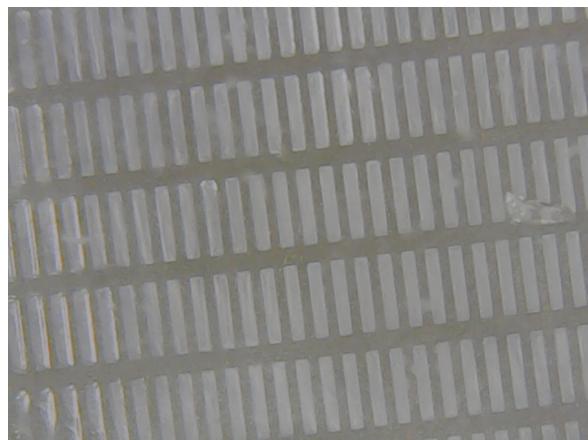


Abbildung 2.2: Aufnahme des Kalibrationsnetzchens der Ausmaße [Skala einfügen]

### 2.3 Messergebnisse

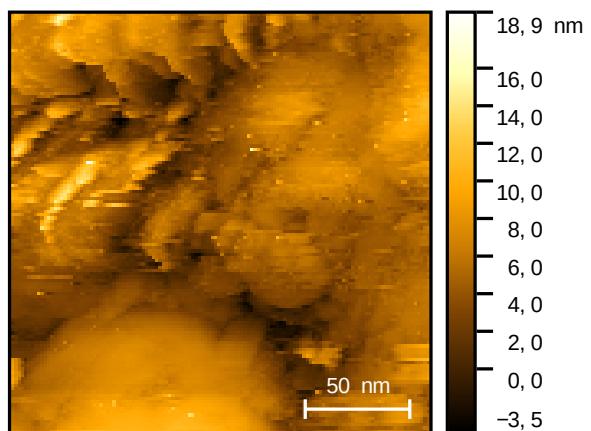


Abbildung 2.4: [parameter]

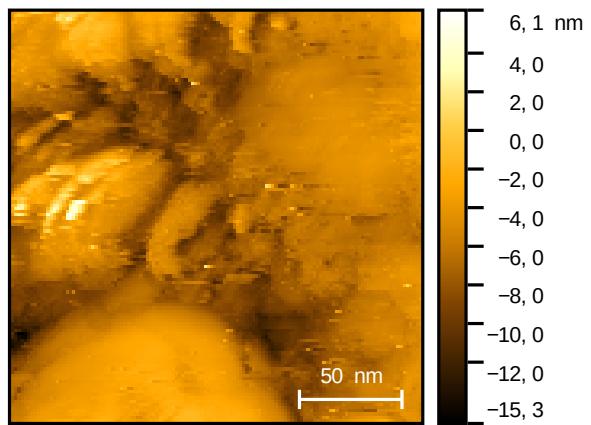


Abbildung 2.5: [parameter]

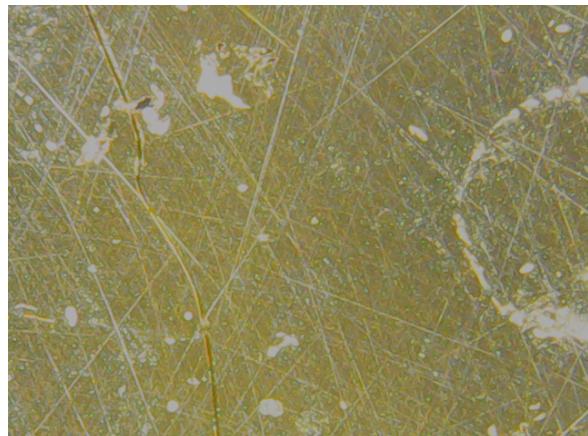


Abbildung 2.3: [skala fehlt noch]

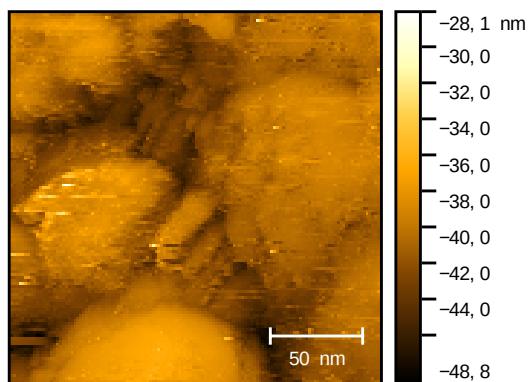


Abbildung 2.6: [parameter]

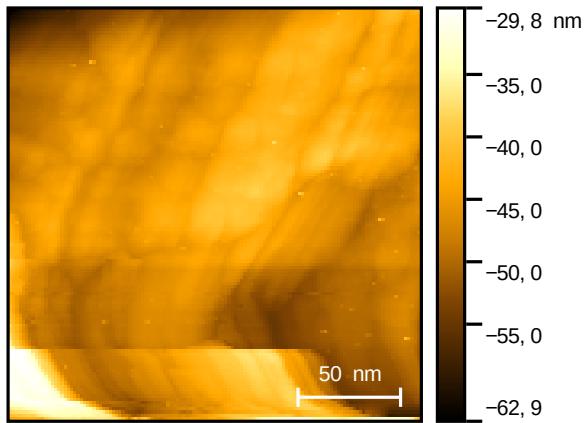


Abbildung 2.7: [parameter]

### 3 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 3.1 [maybe cite this] .

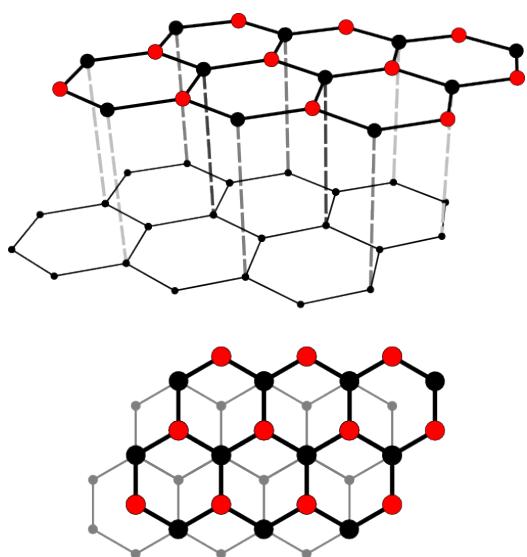


Abbildung 3.1: Schematische Darstellung der Kristallstruktur von HOPG[4]

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 [9].

#### 3.1 Durchführung

Die HOPG Probe wird zunächst unter dem USB Mikroskop dokumentiert (siehe ??)

Abbildung 3.2: Aufnahme der genutzten HOPG Probe

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 3.2 aufgenommen und eine geeignete Flache Stelle gesucht.

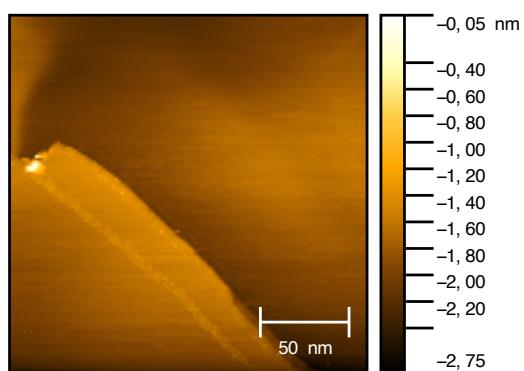


Abbildung 3.3: Übersichtsaufnahme der Graphitoberfläche im konstanten Strom Modus [scanspeed]

In der unteren linken Hälfte der Aufnahme 3.2 fand sich eine Stufe, ansonsten wird die Oberfläche als eben identifiziert. Es wird im weiteren ein Ausschnitt in der rechten oberen Hälfte von Abbildung 3.2 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.

Index	$\varphi/^\circ$	Länge $L/\text{nm}$
1	$161 \pm 1$	$1,24 \pm 0,03$
2	$162 \pm 1$	$1,26 \pm 0,03$
6	$160 \pm 1$	$1,26 \pm 0,03$
3	$40 \pm 1$	$1,26 \pm 0,03$
4	$40 \pm 1$	$1,26 \pm 0,03$
5	$39 \pm 1$	$1,29 \pm 0,03$

Tabelle 3.1: Längen und Winkel relativ zur horizontalen der in 3.3 markierten Linien. Die Unsicherheiten ergeben sich aus der Ausdehnung der Maxima.

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

## 3.2 Auswertung

In den Aufnahmen erwarten wir gemäß [reference graphic], ein Muster gleichseitigen Dreiecks mit Seitenlänge 0,246 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.

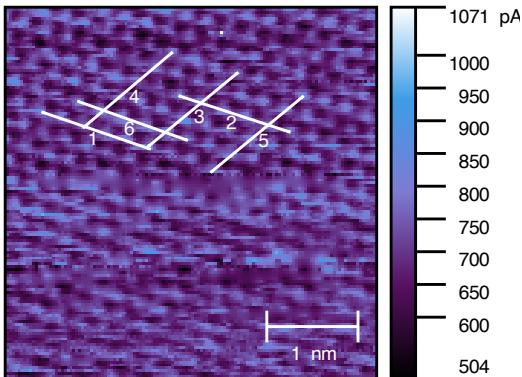


Abbildung 3.4: [scanspeed]

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 3.1 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[6, S. 8–9]. Es ergibt sich

für die erste Richtung (repräsentiert durch die Linien 1, 2, 6) ein Mittlerer Winkel von  $\varphi_1 = (161 \pm 1)^\circ$  und ein Abstand von  $L_1 = (0,251 \pm 0,004)$  nm. Die selben Berechnungen für die zweite Gruppe (aus Linie 3, 4 und 5) ergeben  $\varphi_2 = (40 \pm 1)^\circ$  und  $L_2 = (0,254 \pm 0,004)$  pm. Die Gitterabstände  $L_1$  und  $L_2$  sind zueinander konsistent und liegen innerhalb einer Standardabweichung zueinander. Der Erwartete Gitterabstand  $d = 0,246$  nm liegt in einer  $2 - \sigma$ -Umgebung zu dem Messwert. Der Winkelunterschied beträgt  $\Delta\varphi = (121 \pm 1)^\circ$ , was dem erwarteten Außenwinkel eines gleichseitigen Dreiecks ( $120^\circ$ ) gut entspricht. Somit konnte sowohl die Winkel als auch Abstände des HOPG Kristallgitters gemessen werden, wenngleich bei den Gitterabständen nur eine Übereinstimmung innerhalb einer  $2 - \sigma$  Umgebung zu vorliegt. Visuell ließ sich die elektronische Struktur von HOPG gut darstellen. Insgesamt lässt dies auf ein recht gut kalibriertes RTM schließen. Die leichten Abweichungen bei den gemessenen Längen lassen sich nicht eindeutig zuordnen, vorstellbar sind aber Hysteresis der Piezoelemente oder Temperaturunterschiede zur Temperatur bei der Kalibration und dadurch veränderte elektrische oder Mechanische Eigenschaften des Regelkreises oder der Piezoelemente.

## 4 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. Die Kristallstruktur einer Schicht ist in der Regel hexagonal. Hierbei sind an der Oberfläche Schwefelatome welche gleichseitige Dreiecke mit einem Abstand von  $d = 0,316\,04\text{ nm}$  die dominant messbare Struktur[3].

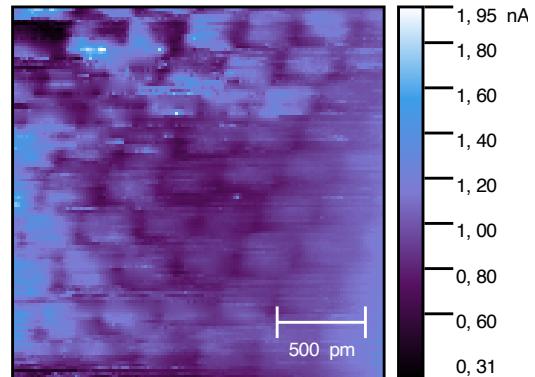


Abbildung 4.1: [caption]

### 4.1 Durchführung

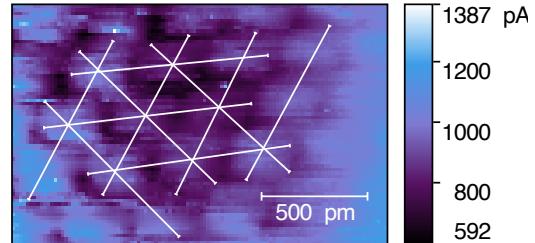


Abbildung 4.2: Ausschnitt von Abbildung 4.1, mit eingezeichnetem Gitter

Das Messverfahren ist grundsätzlich gleich dem in Abschnitt 3.1 beschriebenen. Zunächst wird die Probe mit einem Tesastreifen präpariert um eine saubere und intakte Fläche zum Messen zu haben. Dann wird ein übersichtsbild im CCM erstellt und eine ausreichend glatte Stelle gesucht. Ein geeigneter Ausschnitt wird gewählt und das Prozedere wiederholt bis ein glatter Ausschnitt mit wenigen Nanometern Kantenlänge gefunden ist. Aufnahmen von den Annäherungsschritten sind im Anhang zu finden [reference]. Es werden Messungen eines kleinen, ebenen Bereichs im CHM angefertigt, zu sehen in Abbildung 4.1. In diese Messung werden nun mit Gwyddion [8] Gitterabstände eingezeichnet und vermessen. Diese Messung sind in Abbildung 4.2 und Tabelle 4.1 zu finden.

Die Abstände wurde für jeweils drei Atome gemessen, so dass die Unsicherheit insgesamt kleiner wird. Die drei Richtungen werden wieder separat behandelt. Man findet dann die mittleren Abstände und Winkel, aufgelistet in Tabelle 4.2.

Index	$\varphi/\text{°}$	$L/\text{nm}$
1	$61 \pm 2$	$0,85 \pm 0,03$
2	$63 \pm 2$	$0,85 \pm 0,03$
3	$61 \pm 2$	$0,83 \pm 0,03$
4	$61 \pm 2$	$0,85 \pm 0,03$
5	$135 \pm 2$	$0,89 \pm 0,03$
6	$137 \pm 2$	$0,89 \pm 0,03$
7	$-45 \pm 2$	$0,90 \pm 0,03$
8	$-173 \pm 2$	$0,98 \pm 0,03$
9	$7 \pm 2$	$0,96 \pm 0,03$
10	$5 \pm 2$	$0,93 \pm 0,03$

Tabelle 4.1: Längen und Winkel der in Abbildung 4.2 eingezeichneten Linien. Die Unsicherheit ergibt sich aus der Ablesegenauigkeit beim suchen der Grenzen der einzelnen Atome. Die Linien wurden zum besseren Mitteln jeweils über den dreifachen Atomabstand gezogen.

Richtung	Index	$\varphi/^\circ$	$L/\text{nm}$
A	1 – 4	$62 \pm 1$	$0,28 \pm 0,01$
B	5 – 7	$136 \pm 1$	$0,30 \pm 0,01$
C	8 – 10	$6 \pm 1$	$0,32 \pm 0,01$

Tabelle 4.2: Mittelwerte der Daten aus Tabelle 4.1.

Die so bestimmten Gitterabstände aus Tabelle 4.2 liegen jeweils innerhalb weniger Prozent von dem erwarteten Wert von  $d = 0,316\,04 \text{ nm}$ . Da der Gitterabstand in alle Raumrichtungen gleich groß ist, ist es sinnvoll den Mittelwert der drei Richtungen zu betrachten. Hierbei ergibt sich ein Wert von  $\bar{L} = (0,30 \pm 0,01) \text{ nm}$ , was innerhalb einer  $1 - \sigma$  Umgebung des Erwartungswerts liegt. Man findet weiterhin die Winkel zwischen den Gruppen als  $\Delta\varphi_{A,B} = |\varphi_A - \varphi_B| = (74 \pm 1)^\circ$ ,  $\Delta\varphi_{A,C} = (56 \pm 1)^\circ$  und  $\Delta\varphi_{B,C} = (50 \pm 1)^\circ$ . Hier ist eine deutlich Abweichung von den Erwarteten  $\Delta\varphi_x = 60^\circ$  festzustellen. Es fällt weiterhin auf, dass die Länge in Richtung A (vgl. Tabelle 4.2) kleiner als der Erwartungswert, die in Richtung C größer (wenngleich noch in einer  $1 - \sigma$  Umgebung zum Erwartungswert) sind. Auch ist in den unkorrigierten Messdaten [referenzieren] eine insgesamte Schieflage zu erkennen. Dies passt insofern gut zusammen, da eine Aufnahme, nicht aus der Flächennormalen die Winkel und Längen verzerrt. Im Fall der Gitterabstände ist dies hier nicht tragisch, da die Änderung zum einen klein ist, zum anderen die A Richtung gestaucht und die C Richtung gestreckt wird, was im Mittel wieder ein gutes Ergebnis liefert.

Qualitativ ist an den Atomaren Aufnahmen von MoS<sub>2</sub> noch anzumerken, dass die Atome eine relativ große Ausdehnung haben, was das exakte vermessen der Gitterstruktur erschwert. Hierbei mag es sinnvoll sein mit geringerem Abstand Messungen durchzuführen (Setpoint des Stroms größer und/oder Tunnelspannung kleiner) um so die Lokalisierung der Gitteratome genauer zu ermöglichen.

## Literatur

- [1] L.E. Barbrow und L. V. Judson. *Weights and Measures of the United States*. National Bureau of Standards Special Publication 447. 1976.
- [2] G. Binnig u.a. “Surface Studies by Scanning Tunneling Microscopy”. In: *Phys. Rev. Lett.* 49 (1 1982), S. 57–61. DOI: 10.1103/PhysRevLett.49.57.
- [3] 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>.
- [4] DeepKling. *Graphit Gitter*. This work is licensed under the Creative Commons Attribution-Share Alike 3.0 International License. To view a copy of this license, visit <http://creativecommons.org/licenses/by-sa/3.0/>. URL: <https://commons.wikimedia.org/wiki/File:GraphitGitter4.png>.
- [5] 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).
- [6] Christian Gerthsen und Dieter Meschede. *Gerthsen Physik*. Springer, 2013. DOI: 10.1007/978-3-662-45977-5.
- [7] *GNU Image Manipulation Program (GIMP)*. Version 3.0.6. Open Source Software. URL: <https://www.gimp.org/downloads> (besucht am 06.12.2025).
- [8] *Gwyddion*. Version 2.69. Open Source Software. URL: <https://gwyddion.net/> (besucht am 07.12.2025).
- [9] *Versuchsbeschreibung P422: Rastertunnelmikroskopie*. Physikalisches Institut, Universität Bonn. URL: <https://uni-bonn.sciebo.de/s/OFYPwvfOVjkYhBE> (besucht am 04.12.2025).