

# STM: Rastertunnelmikroskopie

Gruppe 56

Ludwig Hollstein, Ines Kluge

Durchführung: 23.02.2018, Abgabe: 09.03.17

Gold:

alles nur qualitativ

alle Profillinien nicht vergleichbar. Analyse somit nicht möglich

Analyse insgesamt unvollständig

HOPG:

intransparente und fehlerhafte Fehlerrechnung in beiden Versuchsteilen

10 nm Bild absolut unbrauchbar

Color-bar fehlt

Präsentation der Ergebnisse nicht gut gelungen

|           | V | D | P |
|-----------|---|---|---|
| Hollstein | 3 | 3 | 1 |
| Kluge     | 3 | 3 | 1 |

# Inhaltsverzeichnis

|  |          |
|--|----------|
| <b>1 Grundlagen und Theorie</b>  | <b>3</b> |
| 1.1 Motivation . . . . .   | 3        |
| 1.2 Tunneleffekt . . . . .   | 3        |
| <b>2 Aufbau und Funktionsweise des STM</b>                             | <b>4</b> |
| <b>3 Versuchsdurchführung</b>  | <b>6</b> |
| 3.1 Versuch 1: Goldprobe . . . . .                                     | 6        |
| 3.2 Versuch 2: Hochorientierter pyrolytischer Graphit (HOPG) . . . . . | 6        |
| <b>4 Auswertung</b>  | <b>7</b> |
| 4.1 Abbildung der Goldprobe . . . . .                                  | 7        |
| 4.2 Kantenhöhe der Graphitprobe . . . . .                              | 11       |
| 4.3 Atomabstand / Korrekturfaktor der Graphitprobe . . . . .           | 13       |

# 1 Grundlagen und Theorie

## 1.1 Motivation

Für die Untersuchung immer kleinerer Strukturen reichen herkömmliche Methoden wie das Lichtmikroskop nicht mehr aus, sodass seit mehreren Jahrzehnten neue Untersuchungsmethoden für immer feinere Auflösungen zum Tragen kommen. Eine relevante ist hierbei das Rastertunnelmikroskop oder auch STM (englisch "*scanning tunneling microscopy*"), das 1981 vom Schweizer Heinrich Rohrer und dem Deutschen Gerd Binnig entwickelt wurde (welche hierfür 1986 den Nobelpreis erhielten), und seitdem in vielfacher Weise in Technik und Forschung zum Einsatz kommt. Einen Vorteil bietet dabei der quantenmechanische Tunneleffekt, der es ermöglicht, Strukturen bis zur atomaren Ebene aufzulösen, ohne dabei die Probe zu berühren und sie somit gegebenenfalls zu beschädigen. In diesem Versuch werden wir die Vorteile des STM nutzen, um die Oberfläche einer Gold- und einer Graphitprobe zu untersuchen.

## 1.2 Tunneleffekt

Die Rasterelektronenmikroskopie beruht in ihrer Funktionsweise auf dem quantenmechanischen Tunneleffekt, welcher es möglich macht, dass Teilchen, wie zum Beispiel Elektronen, in der Lage sind, eine Potenzialbarriere mit einem Potenzial welches größer ist als die Energie des Teilchens, zu durchqueren. Dies wäre im klassischen Fall unmöglich. In der Quantenmechanik besitzt das Teilchen durch die Lösung der Schrödingergleichung eine Wellenfunktion  $\phi = A\exp(ikx) + B\exp(-ikx)$ , mit einer einfallenden und einer reflektierten Komponente. Trifft die Welle auf die Potentialbarriere, wird allerdings auch ein Teil transmittiert, dieser wird dabei exponentiell geschwächt ( $\phi_T = C\exp(\kappa x) + D\exp(-\kappa x)$ ). Der Transmissionskoeffizient, also das Verhältnis aus einfallender und transmittierter Stromdichte, ergibt sich damit zu:

$$T = \frac{16k^2\kappa^2}{(k^2 + \kappa^2)^2} e^{-2\kappa d} \quad (1)$$

mit  $k^2 = 2mE/\hbar^2$  und  $\kappa^2 = 2m(V_0 - E)/\hbar^2$ . Der Transmissionskoeffizient hängt also sowohl von der Breite als auch der Höhe der Potenzialbarriere ab, in unserem Fall also die Austrittsarbeit der Elektronen.

Der Effekt lässt sich auch mithilfe des Bändermodells erklären. Auf beiden Seiten der Barriere, Spitze und Probe, sind die elektrischen Zustände bis zur Fermienergie aufgefüllt, also keine freien Zustände vorhanden. Ohne angelegte Spannung sind die beiden Seiten also auf gleichem Potential und es findet kein Teilchenstrom statt. Dies kann geändert werden durch eine angelegte Spannung, welche die beiden Fermi-niveaus gegeneinander verschiebt. Neben der Höhe der Spannung ist außerdem die Zustandsdichte auf beiden Seiten des Potentials relevant, die angibt, wieviele Zustände am Strom beteiligt sind. Die Zustandsdichte ist auch die Größe, die mit einem Rastertunnelmikroskop abgebildet werden kann. Für eine konstante Zustandsdichte erhält man für den Tunnelstrom den Zusammenhang:

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

## 2 Aufbau und Funktionsweise des STM

Die zentralen Elemente des STM sind die feine Spitze, sowie die zu untersuchende Probe, über die mit der Spitze gerastert wird. Der Abstand zwischen Spitze und Probe beträgt im Allgemeinen ungefähr 0,1 nm. Die Relativbewegung zueinander, die extrem fein (auch im nm-Bereich) erfolgen muss, wird mit Piezo-Kristallen realisiert. Diese haben bei angelegter Spannung eine Deformation im Bereich nm/V. Eine schematische Funktionsweise ist in Abbildung 1 zu sehen. Vor der Messung wird ein Stromsollwert  $I_0$  eingestellt. Nun

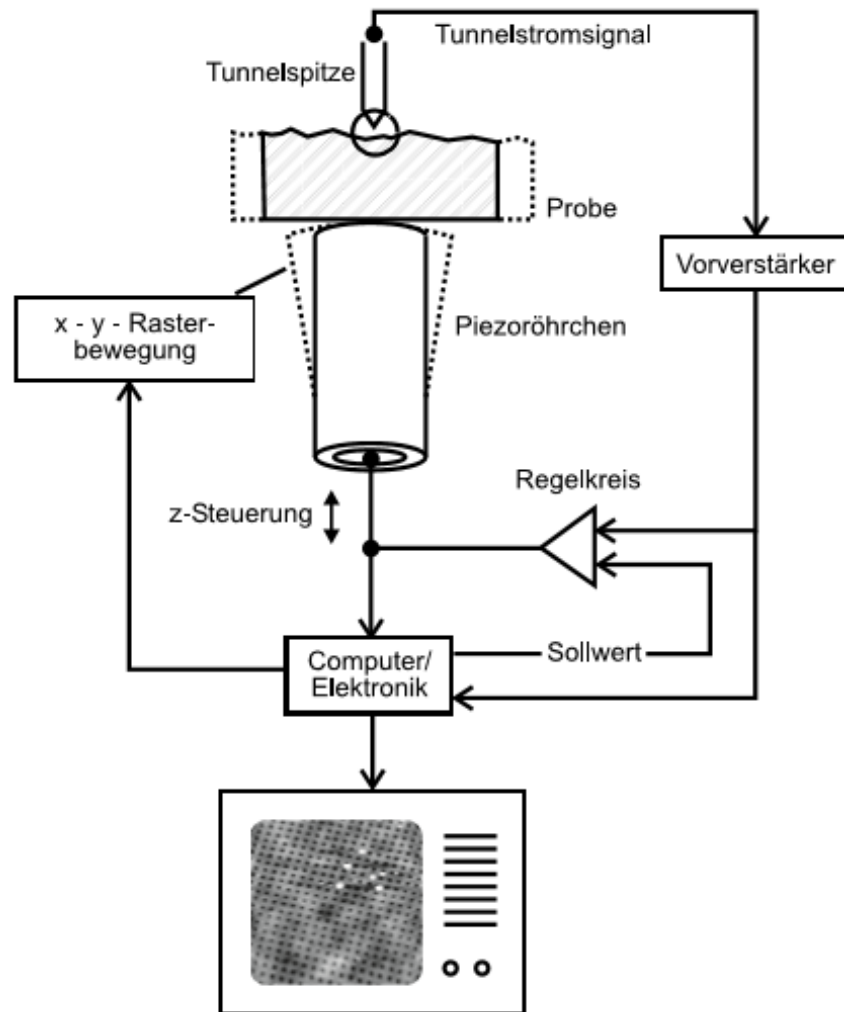


Abbildung 1: Prinzip des Rastertunnelmikroskops.

wird die Spitze der Probe angenähert und parallel der an der Spitze gemessene un über einen Vorverstärker verstärkte Strom mit diesem verglichen. Wird  $I_0$  erreicht, stoppt die Bewegung der Spitze in z-Richtung und die Rasterung kann beginnen, wofür die entsprechenden Piezo-Kristalle benutzt werden. Hierbei muss die Spitze je nach Aufnahmeform

immer nachgeregelt werden, was nach dem Prinzip der **PID-Regelung** erfolgt. P, I und D stehen dabei für Proportional-, Integral- und Differentialteil. Das Prinzip regelt die Stellgröße der Spitze  $Y(t)$  nach der Formel

$$Y = gE(t) + h \frac{1}{T_I} \int_t -T_I^t E(\tau) d\tau + j T_D \frac{dE(t)}{dt} \quad , \quad (3)$$

wobei  $E(t) = I(t) - S$  die Abweichung des gemessenen Stroms vom Sollwert bezeichnet, auch Fehlersignal genannt. Der I-Teil dient primär als Fehlerausgleich, um einen zu niedrigen Stromwert zu verhindern, der sich bei Schwankungen um den Sollwert sonst einstellen würde. Der D-Teil wird in unserem Fall komplett vernachlässigt. Je nach Einstellung gibt es zwei Betriebsmodi zur Datenaufnahme, den **Konstant-Strom-Modus**, bei dem die Höhe der Spitze variiert wird, sodass der Tunnelstrom konstant bleibt und die Spitze damit die Topografie der Probe abbildet, sowie der **Konstant-Höhen-Modus**, bei welchem der gemessene Tunnelstrom variiert und so Rückschlüsse auf die Topografie zulässt.

Bei ideal eingestelltem Regler sollte das Tunnelsignal im Konstant-Strom-Modus konstant sein, allerdings ist das in der Praxis häufig nicht der Fall, was Auswirkungen auf die Regelung und damit das z-Bild hat. In Abbildung 2 sind die drei möglichen Fälle beispielhaft zu sehen. Im Fall von zu langsamer Regelung sieht man, dass der Strom an

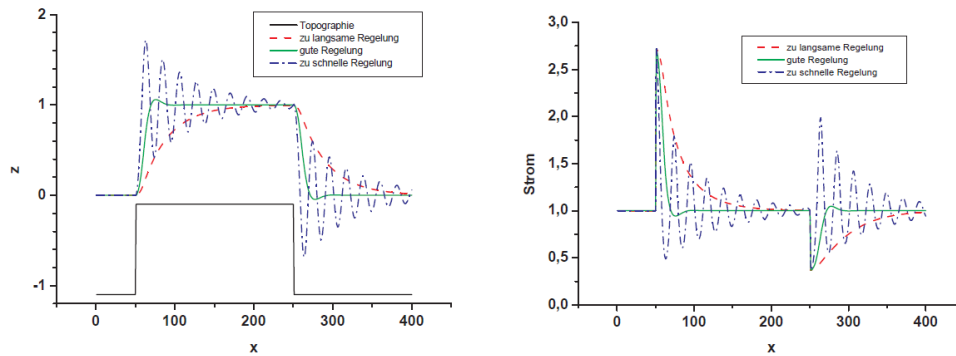


Abbildung 2: Simulation von z-Bild und Strom-Bild im Konstant-Strom-Modus bei verschiedenen Regelungsgeschwindigkeiten.

den Kanten stark ansteigt, aber die Spitze nur langsam nachregelt. Dementsprechend ist der Strom über eine längere Zeit erhöht und fällt nur langsam wieder auf das konstante Niveau ab. Im gegensätzlichen Fall von zu schneller Regelung reagiert die Spitze zwar direkt, allerdings kommt es zum Überschwingen und die Stromkurve pendelt sich nur langsam auf den gewünschten Wert ein. Im Idealfall sind beide Effekte minimiert, die Spitze reagiert zwar direkt auf die Kante und regelt schnell nach, nach einem anfänglichen Schock (im Strombild als Peak zu sehen) pendelt sie sich allerdings direkt wieder ein und der Strom kehrt auf das konstante Niveau zurück.



### 3 Versuchsdurchführung

#### 3.1 Versuch 1: Goldprobe

Im ersten Versuchsteil wird eine Goldprobe untersucht. Um die optimalen Parameter zu finden, werden zunächst Größen wie die Spannung, der Strom und der Bildausschnitt variiert. Die eingestellten Werte, zum Aufnehmen der folgenden Messung sind

$$\begin{aligned}U &= 0,9 \text{ V} \\I &= 1 \text{ nA} \\ \text{Bildgröße} &= 200 \text{ nm} \\ \text{Rasterzeit} &= 200 \text{ ms}\end{aligned}$$

Anschließend wird der Integralteil I\_Gain verändert, und damit die Geschwindigkeit der Regelung. Ist dort ein guter Wert gefunden worden, wird nun die Rasterzeit (time per line) variiert, und der Effekt auf die Bilder beobachtet.

#### 3.2 Versuch 2: Hochorientierter pyrolytischer Graphit (HOPG)

Im zweiten Versuchsteil wird eine Probe hochorientierten Pyrolytischen Graphits (HOPG) untersucht. Dieses zeichnet sich durch eine hexagonale Kristallstruktur in x-y-Richtung mit starken  $\pi$ -Bindungen aus, in z-Richtung herrschen zwischen den einzelnen Atomenebenen allerdings nur schwache Van-der-Waals-Kräfte, weshalb sich Ebenen leicht voneinander spalten und verschieben lassen. Deshalb ist es auch möglich, in der Probe über große Flächen ausgedehnte, ununterbrochene Schichten zu erzeugen. Allerdings findet man auch Stufenkanten zwischen zwei Ebenen. Ziel ist es, eine solche Stufenkante zu finden, abzubilden und an insgesamt drei verschiedene Bildausschnittsgrößen heranzuzoomen, um dann jeweils die Höhe der Stufenkante zu ermitteln und mit dem erwarteten Wert zu vergleichen.

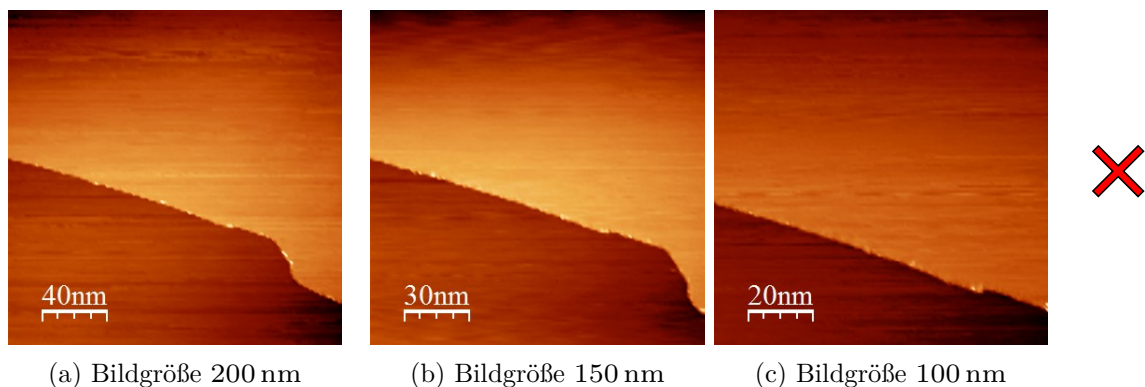


Abbildung 3: Aufnahme einer HOPG-Stufenkante bei verschiedenen Bildgrößen (Jeweils Strombild der Hinwärtsbewegung).

Die Aufnahmen der Stufenkante in jeweils verschiedener Vergrößerung ist in Abbildung 3 zu sehen. Außer der Bildgröße werden hierbei alle anderen Parameter konstant

gehalten, diese besitzen folgende Werte:

| SollStrom $I$ | Spannung $U$ | I-Gain | Time/Line |
|---------------|--------------|--------|-----------|
| 1 nA          | 1 V          | 2000   | 300 ms    |

Tabelle 1: Verwendete Parameter des STM bei der Aufnahme der Stufenkante.

Da die Atomebenen nicht immer perfekt horizontal ausgerichtet sind, wird die Scanning-Software WSxM verwendet, um das Bild der Probe zu begradigen. Für jede Höhe werden jeweils drei Bilder aufgenommen und ausgemessen, um die statistische Aussagekraft der Ergebnisse zu verbessern.

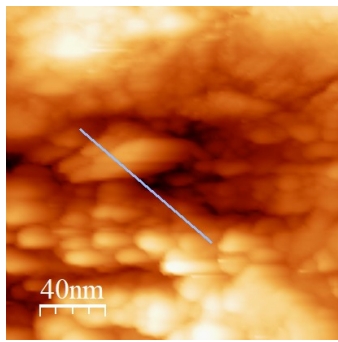
Im zweiten Teil des Versuchs soll der Bildausschnitt weiter vergrößert werden, um am Ende eine atomare Auflösung des Atomgitters zu erreichen und aus den extremen der Ladungsverteilung ( $\alpha$ -Sites) atomare Strukturen zu erkennen. Hierzu werden die Parameter Bildgröße sowie Spannung und Stromsollwert geändert, um einen möglichst kleinen Abstand zwischen Spitze und Probe zu erreichen. Anschließend sollen sowohl für die x- als auch die y-Richtung Korrekturfaktoren bestimmt werden für das Verhältnis des erwarteten, gegebenen Gitterabstands und des experimentell bestimmten. Die benutzte Methode mithilfe des Kosinussatzes wird in der Auswertung genauer erläutert.

## 4 Auswertung

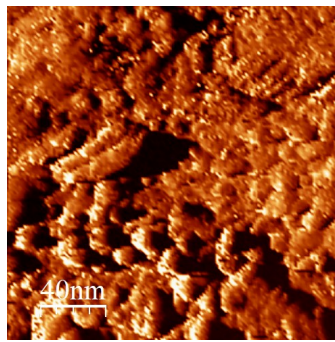
### 4.1 Abbildung der Goldprobe

Als ersten Schritt wird mit den eingestellten Parametern der Integralteil I\_Gain verändert. Im folgenden werden vier Fälle dargestellt. Abbildung 4 zeigt den Fall einer zu langsamen Regelung. Es ist deutlich zu sehen, dass das z-Bild verwaschen und unscharf ist. Im Strombild ist eindeutig die Topographie zu sehen, was ein Zeichen für eine zu langsame Regelung ist. Im Gegensatz dazu zeigt Abbildung 7 den Fall einer zu schnellen Regelung. In dem Bild sind viele helle Flecken zu sehen, die wahrscheinlich vom Überspringen der Spitze kommen. Auch in Abbildung 6 tauchen diese Flecken auf, allerdings viel schwächer. Abbildung 5 ist dagegen schärfer und stellt in unserem Fall die optimale Regelung dar. Um die Bilder quantitativ auswerten zu können, wird nun mit der Multiple-Profile Funktion noch eine Profillinie durch die selbe Stelle bei allen vier Bildern gelegt. Dadurch lässt sich erkennen, dass im Bild mit langsamer Regelung (Abb. 4) die Profillinien sehr weich und glatt gezeichnet sind, wohingegen man in den Bildern mit schneller Regelung (Abb. 7 und 6) das Überspringen gut erkennbar ist. Abbildung 5 mit einem I\_Gain von 4000 stellt dagegen ein gutes Mittelmaß dar. Dieser Wert für I\_Gain wird nun beibehalten und die Rasterzeit in einem Bereich von 0.1s-0.5s verändert. In Abbildung 8 und 9 sind einmal die Vorwärtsbilder und einmal die Rückwärtsbilder für die vier Rasterzeiten zu sehen. Während eine Rasterzeit von  $t = 0,1\text{ s}$  zu kurz ist, da das Bild so nicht gut aufgelöst werden kann, ist bei den höheren Rasterzeiten kaum ein Unterschied feststellbar. Auf die Abbildung der Strombilder wird in diesem Teil verzichtet, da daraus keine weiteren Informationen entnommen werden können.

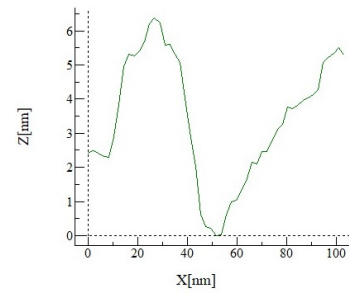




(a) z-Bild

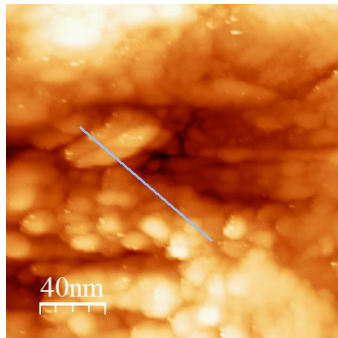


(b) Strombild

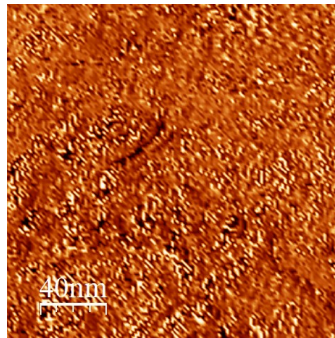


(c) Profil

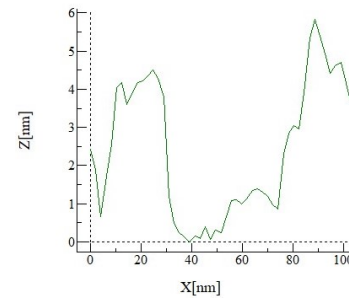
Abbildung 4: Zu langsame Regelung bei  $I\_Gain = 1000$ .



(a) z-Bild

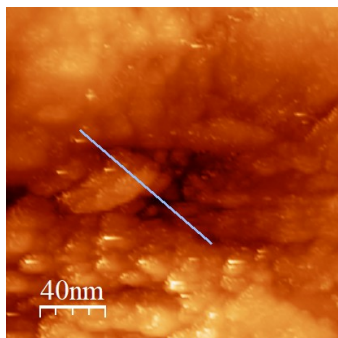


(b) Strombild

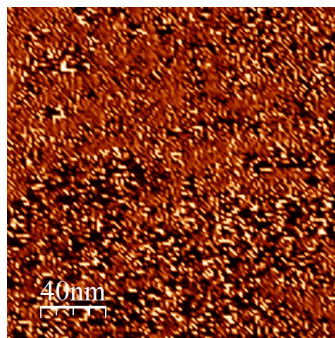


(c) Profil

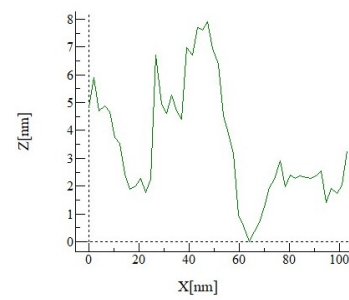
Abbildung 5: Optimale Regelung bei  $I\_Gain = 4000$ .



(a) z-Bild



(b) Strombild



(c) Profil

Abbildung 6: Regelung bei  $I\_Gain = 6000$ .



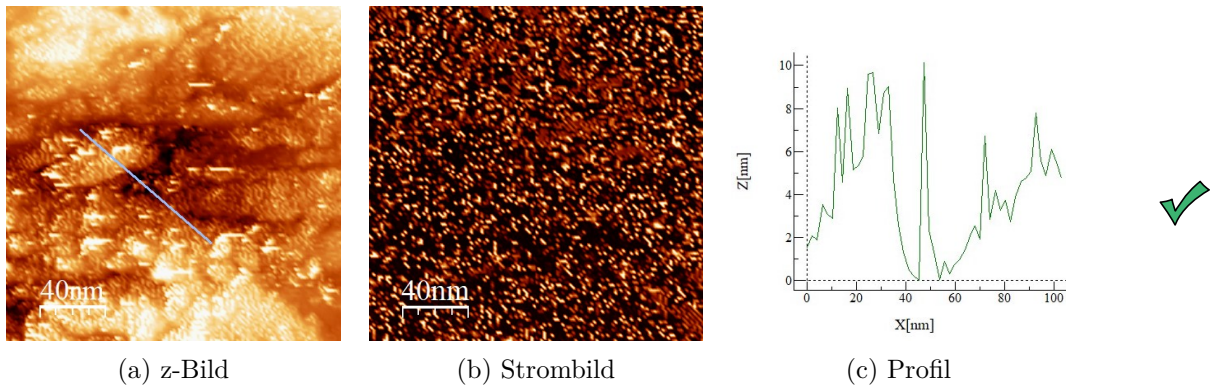


Abbildung 7: Zu schnelle Regelung bei I\_Gain = 8000.

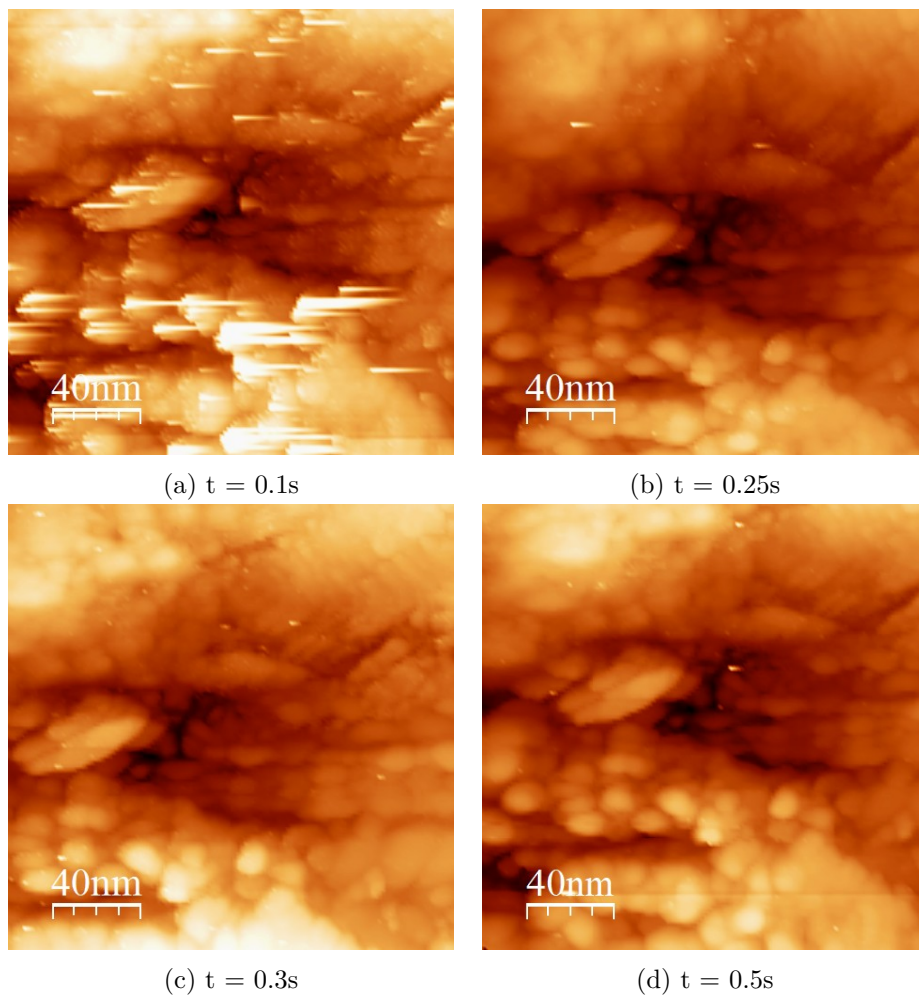
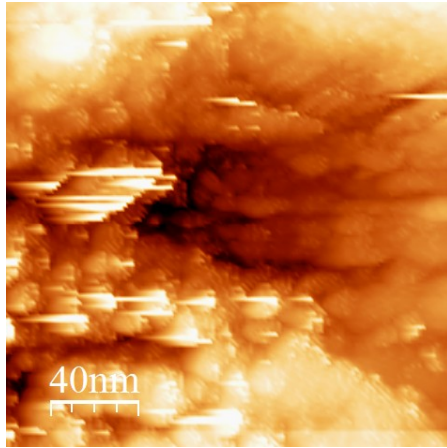
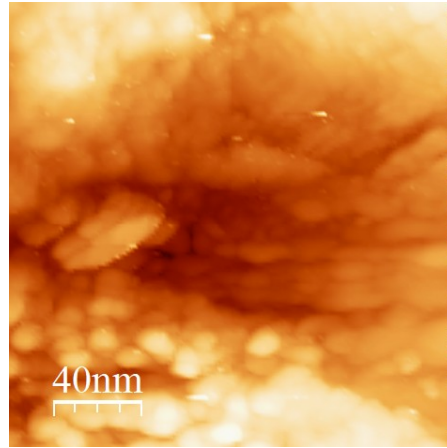


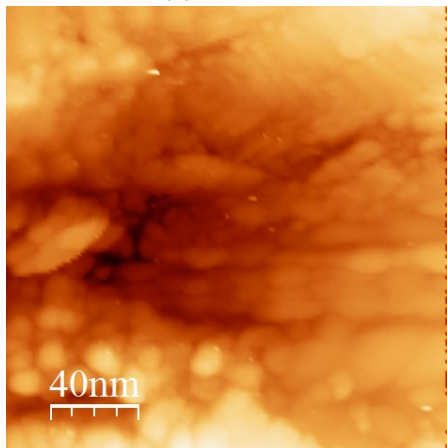
Abbildung 8: Variation der Rasterzeit (time/line) - Vorwärtsbild.



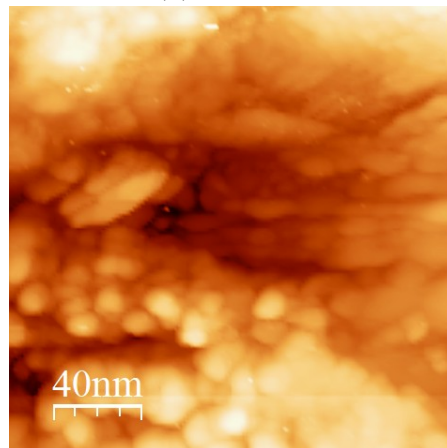
(a)  $t = 0.1\text{s}$



(b)  $t = 0.25\text{s}$



(c)  $t = 0.3\text{s}$



(d)  $t = 0.5\text{s}$

Abbildung 9: Variation der Rasterzeit (time/line) - Rückwärtsbild.

## 4.2 Kantenhöhe der Graphitprobe

Zur Auswertung der Höhe der Stufenkante wird die Profile Funktion in WSxM verwendet. Davor ist es allerdings noch nötig, das Bild mit der Flatten-Funktion oder der Local-Plane-Funktion zu begradigen. In der folgenden Auswertung wird nur Local-Plane verwendet, da es mit dieser möglich ist, Teile des Bildes einzuebnen und nicht direkt das ganze Bild, wie es bei Flatten der Fall wäre. Die Ausmessung wird hier exemplarisch an der Aufnahme bei Bildgröße 200 nm gezeigt. Nach entsprechender Korrektur des Bildes werden jeweils 3 Profillinien an die Kante gezeichnet (Abb. 10). In die Diagramme, welche das Programm ausgibt, werden manuell zwei Ausgleichgeraden an die beiden Plateaus gelegt (11) und daraus die Differenz zur Bestimmung der Kantenhöhe gebildet. Die Ergebnisse sind in Tabelle 2 aufgeführt. Aus diesen Daten kann nun der Mittelwert samt Standardabweichung berechnet werden (Tabelle 2). Wird nun das gewichtete Mittel daraus gebildet, so ergibt sich eine Höhe von  $\overline{\Delta z} = (6,735 \pm 0,048) \text{ \AA}$ . Das entspricht  $2.01 \pm 0.01$  Atomlagen<sup>1</sup>.

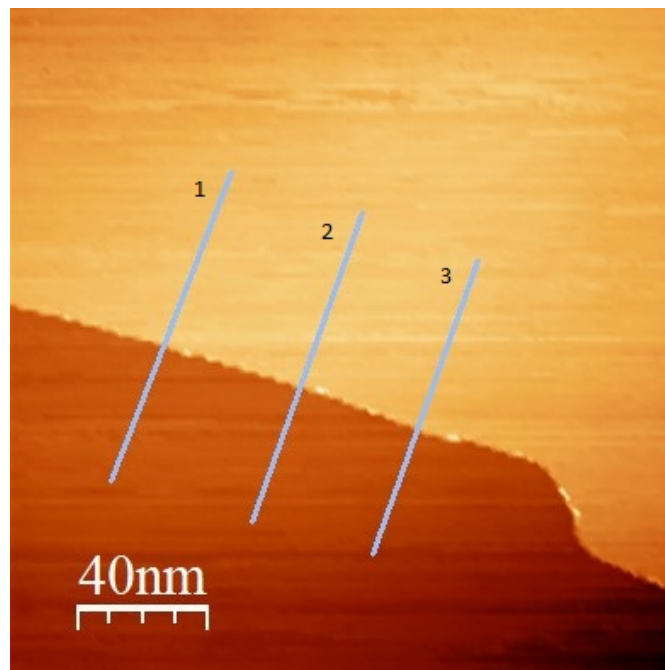


Abbildung 10: Vermessung der Graphitkante mittels 3 Profillinien für eine Bildgröße von 200 nm.

---

<sup>1</sup>Zwei Atomlagen Graphit haben einen Abstand von  $3,35 \text{ \AA}$

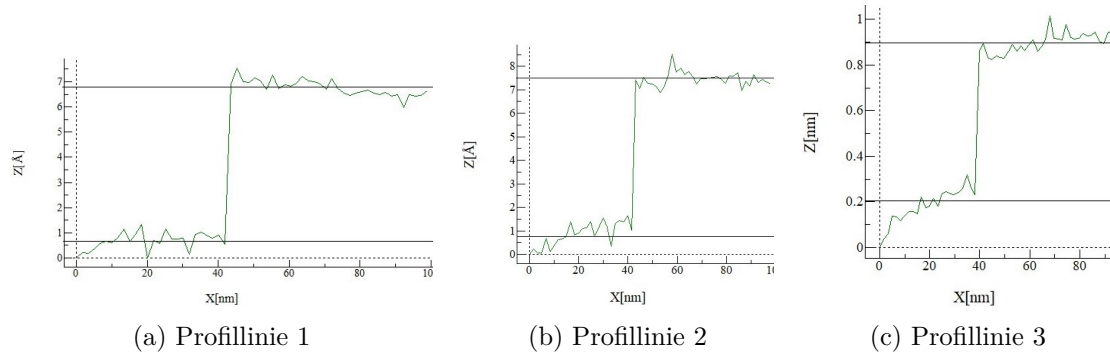


Abbildung 11: Auswertung der eingezeichneten Profillinien.

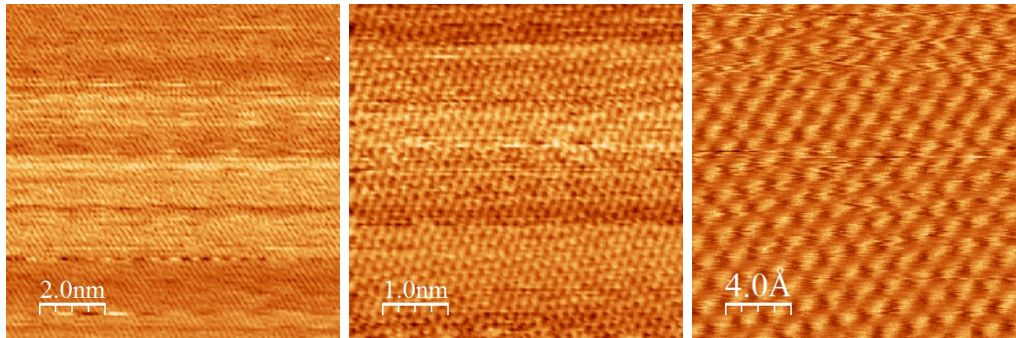
| Bildgröße | Kante              | Kantenhöhe in Å |       |       | $\overline{\Delta z}$ |
|-----------|--------------------|-----------------|-------|-------|-----------------------|
|           |                    | 1               | 2     | 3     |                       |
| 200 nm    | $z_{\text{oben}}$  | 6.759           | 7.528 | 8.980 | $6.614 \pm 0.404$     |
|           | $z_{\text{unten}}$ | 0.603           | 0.761 | 2.050 |                       |
|           | $\Delta z$         | 6.156           | 6.767 | 6.92  |                       |
| 150 nm    | $z_{\text{oben}}$  | 7.297           | 7.722 | 8.298 | $6.730 \pm 0.441$     |
|           | $z_{\text{unten}}$ | 0.981           | 1.043 | 1.101 |                       |
|           | $\Delta z$         | 6.316           | 6.679 | 7.194 |                       |
| 100 nm    | $z_{\text{oben}}$  | 7.087           | 7.333 | 7.940 | $6.818 \pm 0.327$     |
|           | $z_{\text{unten}}$ | 0.477           | 0.685 | 0.745 |                       |
|           | $\Delta z$         | 6.610           | 6.648 | 7.195 |                       |



Tabelle 2: Vermessung der Stufenkante: Jeweils 3 Messungen pro Bildgröße.

### 4.3 Atomabstand / Korrekturfaktor der Graphitprobe

In diesem Versuchsteil soll zunächst eine glatte Stelle der Probe gesucht und diese an dieser Stelle weiter vergrößert und weiter hineingezoomt werden, um eine atomare Auflösung zu erlangen. Hiermit werden anschließend die Bildgröße in x- und y-Richtung sowie die zugehörigen Korrekturfaktoren bestimmt. Hierfür werden drei unterschiedlich große Bildausschnitte gewählt. In unserem Fall betragen die Bildausschnittsgrößen 10 nm,



(a) Bildgröße = 10 nm

(b) Bildgröße = 5 nm

(c) Bildgröße = 2 nm

Abbildung 12: Aufnahme des Graphengitters bei verschiedenen Bildgrößen.

5 nm sowie 2 nm. Für die restlichen Parameter gilt für eine Annäherung generell, dass der Sollwert des Stromes erhöht werden und die Spannung erniedrigt. Ersteres sorgt dafür, dass die Probe der Spitze näher kommen muss, damit der geforderte Strom registriert werden kann, letzteres bewirkt, dass der Tunnelstrom mit der Entfernung in z-Richtung an sich niedriger ist. Daraus kommen die Werte in Tabelle 3 für  $U$  und  $I$  zustande: Die



| Bildgröße | Sollstrom $I$ | Spannung $U$ |
|-----------|---------------|--------------|
| 10 nm     | 10 nA         | 1 V          |
| 5 nm      | 3 nA          | 1 V          |
| 2 nm      | 3 nA          | 200 mV       |

Tabelle 3: Benutzte Parameter für Strom und Spannung bei verschiedenen Bildgrößen.

Parameter werden darüber hinaus divers variiert, um ihren Einfluss auf das aufgenommene Bild zu analysieren und die Qualität der Aufnahme zu verbessern. Deshalb stellt Tabelle 3 die experimentell gefundenen jeweils optimalen Parameter dar. Der I-Gain wird bei dieser Messung stark verringert, so dass die Spitze sehr träge reagiert und praktisch nur Höhenunterschiede durch Schräglage ausgleicht. Wir wählen hierfür einen I-Gain von 100. Es wird also effektiv im Konstant-Höhen-Modus gemessen, weshalb sich die Topografie der Probe auch primär im Strombild wiederfinden lässt.

Ziel des Versuchs ist es nun, den Gitterabstand des Gitters zu berechnen. Hierbei sei an dieser Stelle darauf hingewiesen, dass die Gitterstruktur der Topografie nicht direkt Atome repräsentiert, sondern Ladungsverteilungen, die allerdings Rückschlüsse auf



die gitterförmige Kristallstruktur zulassen. Grundlage hierfür ist, dass die hexagonalen Gitterebenen zueinander verschoben und im ABAB-Muster angeordnet sind. Dadurch besitzt nur jedes zweite Atom einen direkten Nachbarn in der darüber- oder darunterliegenden Schicht, diese werden auch als  $\alpha$ -Sites bezeichnet. Aus diesem Grund sind die Atome in ihrer elektronischen Struktur nicht gleichberechtigt, sodass die  $\alpha$ -Sites bei RTM-Aufnahmen hervorgehoben erscheinen. Dadurch kommt ein Gittermuster mit einem Gitterabstand von 2,46 Å zustande. Eine nützliche Methode ist hier die Anwendung des Kosinussatzes, um Gitterkonstante sowie Korrekturfaktoren in x- sowie in y-Richtung zu bestimmen. Hierbei wird ausgenutzt, dass das Graphit in einer hexagonalen Struktur angeordnet ist, also in einem Winkel von je 60°. Die ausgemessenen  $\alpha$ -Sites schließen somit je nach Richtung einen Winkel  $\theta$  von 120° bzw 60° ein. Mit dem Kosinussatz ergibt sich daraus:

$$c^2 = a^2 + b^2 + 2ab \cos \theta = a^2 + b^2 \pm ab \quad (4)$$

Dabei müssen  $a$  und  $b$  ganzzahlige Vielfache des Gitterabstands  $d$  sein, also  $a = n \cdot d$  und  $b = m \cdot d$ , somit ergibt sich:

$$c^2 = d^2(n^2 + m^2 + nm) \quad , \quad d = \frac{c}{\sqrt{n^2 + m^2 + nm}} \quad (5)$$

woraus sich also die Gitterkonstante  $d$  berechnen lässt, wenn man horizontale bzw vertikale Profillinien  $c$  in das Gitter einzeichnet. Wir führen dieses Vorgehen für jede aufgenommene Bildgröße jeweils dreimal in x- und dreimal in y-Richtung durch. Dabei sei hinzugesagt, dass beim Bildgrößenausschnitt von 10 nm zusätzlich ein **Ablesefehler** auf  $c$  angenommen wird, da bei dieser Vergrößerung die atomaren Strukturen noch sehr schlecht erkennbar sind und Unschärfefeffekte stärker ins Gewicht fallen als bei den anderen Bildgrößen. Hierdurch kommen für die drei Bildgrößen jeweils folgende Ergebnisse zustande: Die Methode ist in den Abbildungen 13 bis 15 noch einmal graphisch deutlich

| Linie            | 1            | 2            | 3            | 1            | 2            | 3            |
|------------------|--------------|--------------|--------------|--------------|--------------|--------------|
| Zwischenräume    | 3+5          | 2+4          | 2+3          | 3+4          | 3+4          | 3+5          |
| Distanz $c$ [nm] | 1.420 ± 0.12 | 1.024 ± 0.10 | 0.782 ± 0.10 | 0.709 ± 0.08 | 0.787 ± 0.13 | 1.181 ± 0.13 |
| Abstand $d$ [Å]  | 2.03 ± 0.17  | 1.94 ± 0.19  | 1.79 ± 0.23  | 1.97 ± 0.22  | 2.18 ± 0.36  | 2.71 ± 0.30  |

Tabelle 4: Bestimmung von  $d$  mithilfe des Kosinussatzes bei Bildgröße 10 nm (Links Messung in vertikaler Richtung, rechts horizontale Messung).

sichtbar. Durch Bilden des Mittelwerts ergibt sich für jede Aufnahme bei unterschiedlicher Bildgröße ein Wert für den Abstand  $d$  zweier  $\alpha$ -Sites (zu sehen in Tabelle 7) Mittelt man die Werte für den horizontalen beziehungsweise vertikalen Bereich getrennt, ergibt sich also für den Abstand der  $\alpha$ -Sites insgesamt ein Wert von  $d = (1,60 \pm 0,15)$  Å im vertikalen und  $d = (1,643 \pm 0,017)$  Å im horizontalen Fall. Da die Werte aufgrund der teils sehr schlechten Auflösung stark voneinander abweichen, wird hier der äußere Fehler benutzt. Wenn man nun ansetzt, dass das Rastertunnelmikroskop nicht exakt kalibriert ist, die angegebenen Längenangaben also nicht den realen entsprechen, so lässt sich

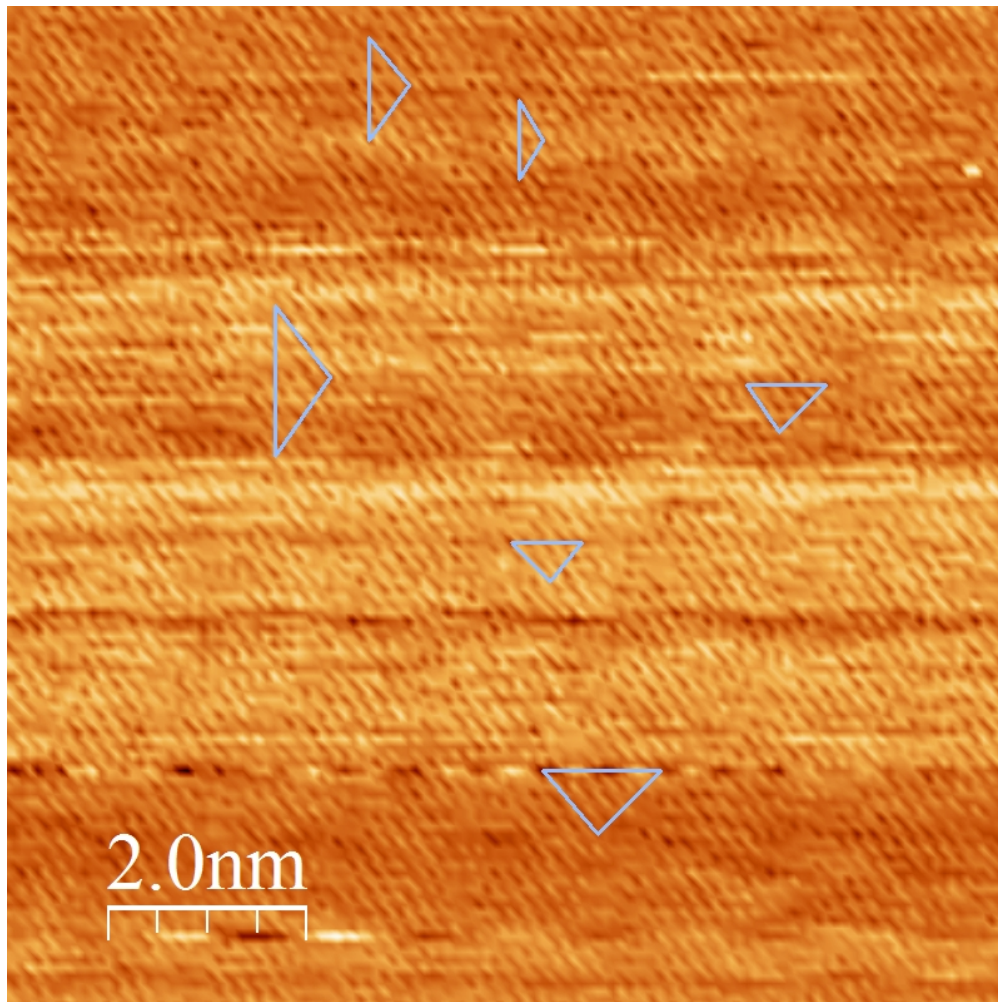


Abbildung 13: Bestimmung von  $d$  mithilfe des Kosinussatzes bei Bildgröße von 10 nm  
(Jeweils 3 Messungen pro Richtung)

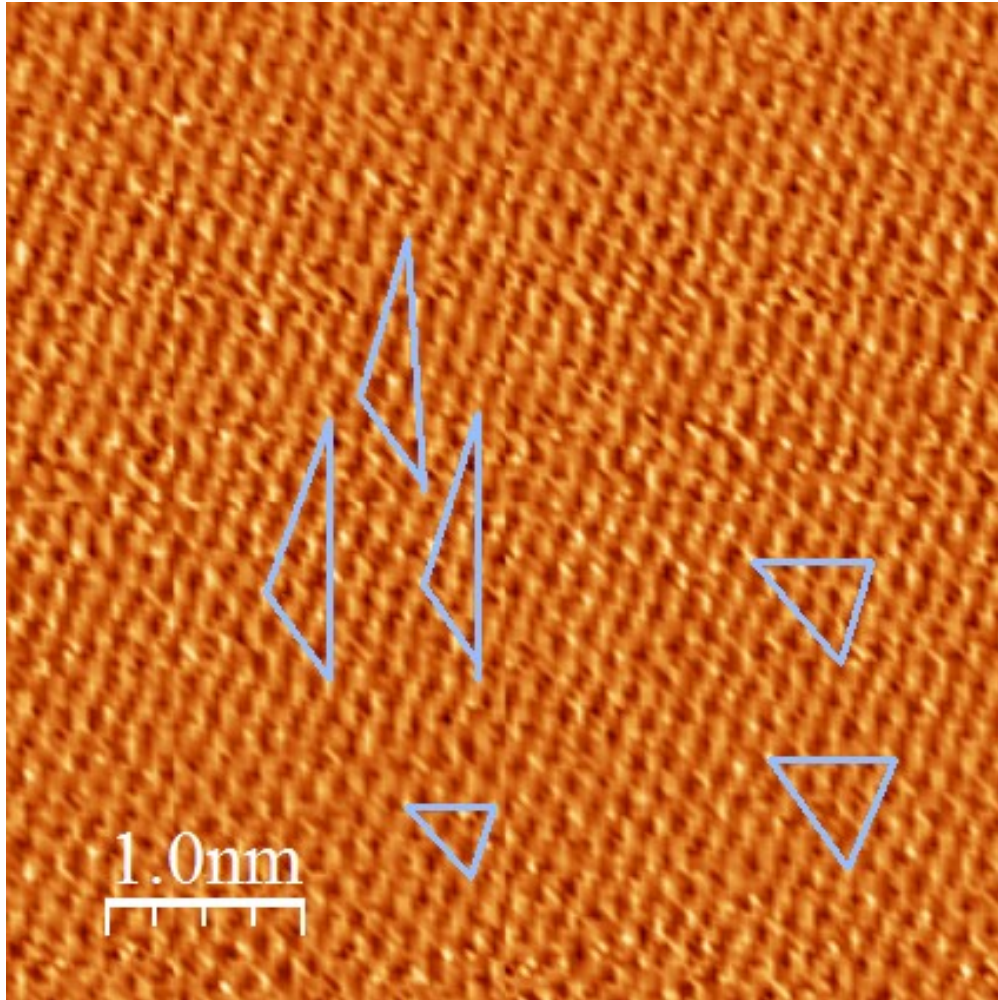


Abbildung 14: Bestimmung von  $d$  mithilfe des Kosinussatzes bei Bildgröße von 5 nm  
(Jeweils 3 Messungen pro Richtung)



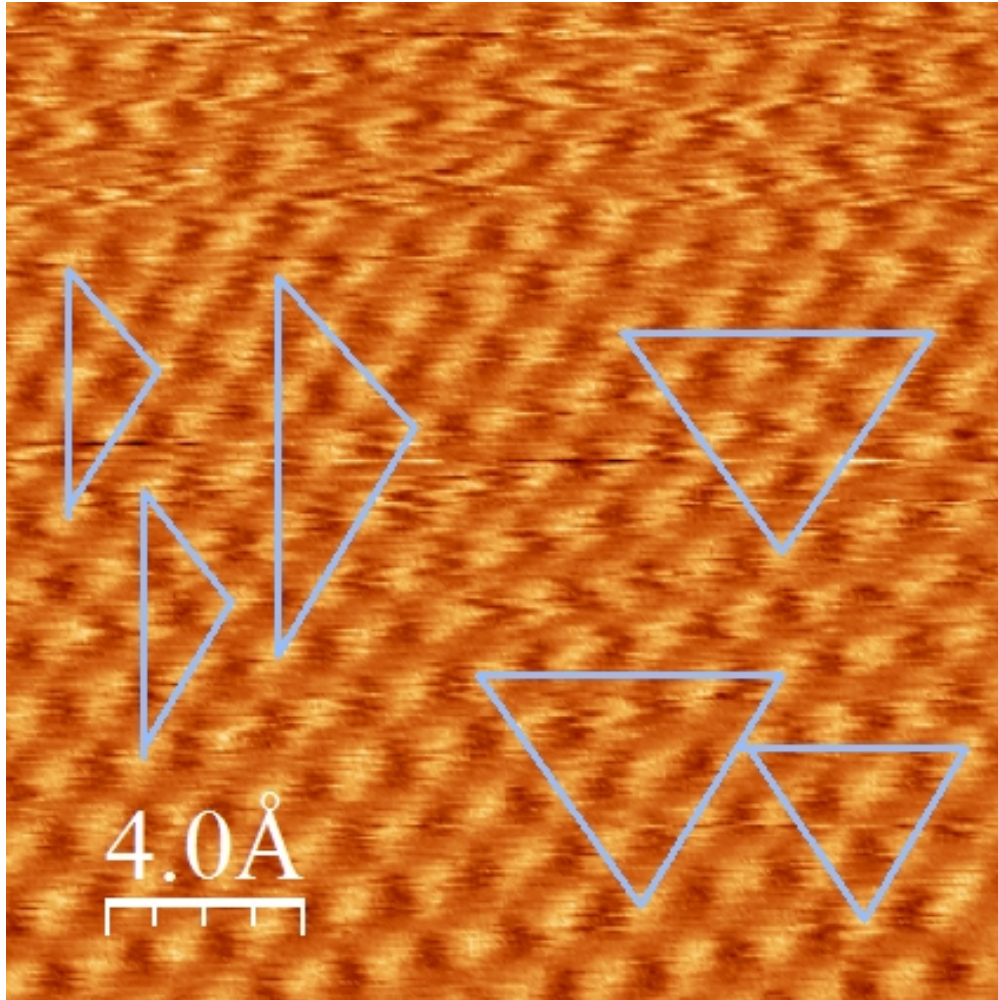


Abbildung 15: Bestimmung von  $d$  mithilfe des Kosinussatzes bei Bildgröße von 2 nm  
(Jeweils 3 Messungen pro Richtung)

| Linie          | 1     | 2     | 3     | 1     | 2     | 3     |
|----------------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| Zwischenräume  | 4+2   | 3+5   | 3+5   | 3+4   | 3+4   | 2+3   |
| Distanz c [nm] | 1.262 | 1.299 | 1.339 | 0.591 | 0.590 | 0.433 |
| Abstand d [Å]  | 2.38  | 1.86  | 1.91  | 1.63  | 1.63  | 1.64  |

Tabelle 5: Bestimmung von d mithilfe des Kosinussatzes bei Bildgröße 5 nm (Links Messung in vertikaler Richtung, rechts horizontale Messung).

| Linie         | 1    | 2    | 3    | 1    | 2    | 3    |
|---------------|------|------|------|------|------|------|
| Zwischenräume | 3+3  | 2+2  | 2+2  | 4+3  | 3+2  | 4+3  |
| Distanz c [Å] | 7.56 | 4.95 | 5.35 | 6.15 | 4.48 | 6.09 |
| Abstand d [Å] | 1.45 | 1.43 | 1.54 | 1.71 | 1.69 | 1.69 |

Tabelle 6: Bestimmung von d mithilfe des Kosinussatzes bei Bildgröße 2 nm (Links Messung in vertikaler Richtung, rechts horizontale Messung).

ein Korrekturfaktor bestimmen, der die gemessenen Distanzen in beide Richtungen kalibriert. Als Referenz wird der Literaturwert für den Gitterabstand zweier  $\alpha$ -Sites benutzt. Hieraus folgt:

$$k_x = \frac{d_{\text{Literatur}}}{d_{\text{gemessen}}} = \frac{2,46 \text{ Å}}{1,60 \text{ Å}} = 1.538 \quad (6)$$

$$k_y = \frac{d_{\text{Literatur}}}{d_{\text{gemessen}}} = \frac{2,46 \text{ Å}}{1,643 \text{ Å}} = 1.497 \quad (7)$$

Mit diesen Faktoren müssen die gemessenen Werte in x- und y-Richtung multipliziert werden, um realistische Ergebnisse zu erhalten.

| Bildgröße                            | 10 nm                       | 5 nm                          | 2 nm                          |
|--------------------------------------|-----------------------------|-------------------------------|-------------------------------|
| Abstand $\alpha$ -Sites (vertikal)   | $(1,94 \pm 0,07) \text{ Å}$ | $(2,05 \pm 0,17) \text{ Å}$   | $(1,47 \pm 0,04) \text{ Å}$   |
| Abstand $\alpha$ -Sites (horizontal) | $(2,22 \pm 0,22) \text{ Å}$ | $(1,633 \pm 0,003) \text{ Å}$ | $(1,697 \pm 0,007) \text{ Å}$ |

Tabelle 7: gemittelte Werte für d bei verschiedener Bildgröße