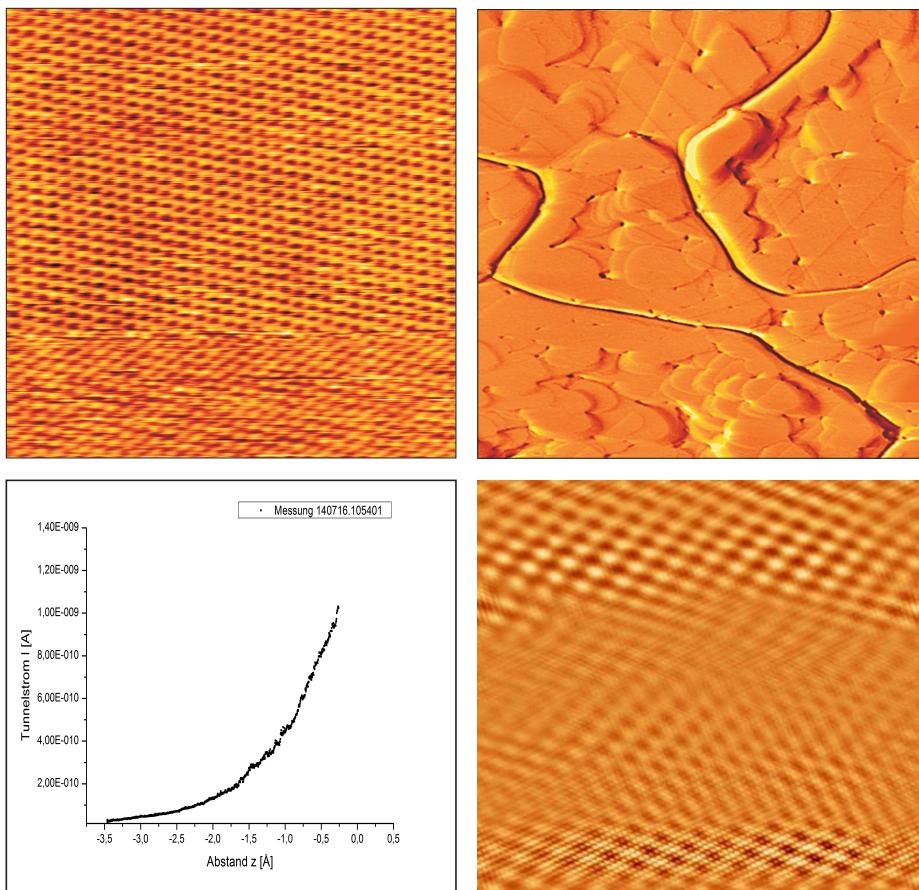


Universität zu Köln

Praktikum B

Versuch 2.5: Rastertunnelmikroskopie

Praktikumsraum: 103, II. Physikalisches Institut



Rastertunnelmikroskopie

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung	3
2 Vorbereitung	4
3 Rastertunnelmikroskopie und -spektroskopie	4
3.1 Tunneleffekt	4
3.2 Anwendung des Tunneleffekts: Das Rastertunnelmikroskop	6
3.3 Rastertunnelspektroskopie	8
3.4 Ladungsdichtewellen auf TaS ₂	9
3.5 Proben	19
4 Versuchsaufbau	22
5 Versuchsdurchführung	26
5.1 Hochorientiertes pyrolytisches Graphit (HOPG)	26
5.2 Ladungsdichtewellen auf TaS ₂	27
5.3 Gold	28
6 Protokoll	30
7 Anhang: STM Elektronik	31
7.1 Beschreibung der einzelnen Bedienelemente der STM Elektronik	31
7.1.1 Die Annäherungsphase	31
7.1.2 Annähern	32
7.1.3 Der Scanvorgang	33
7.1.4 Aufnahme von Spektren	36
8 Anhang: Beschreibung WSxM	38
9 Fragebogen	40

1 Einleitung

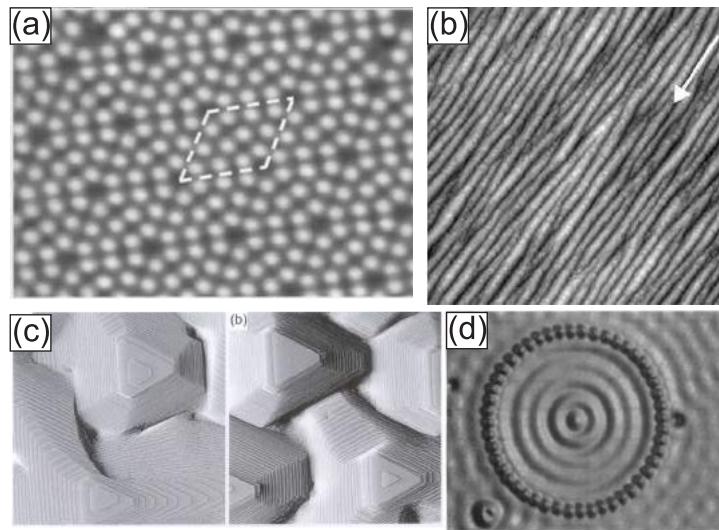


Abbildung 1: (a) Rastertunnelmikroskopie Aufnahme der Si(7×7) Rekonstruktion [5]. (b) Pt(111) nach Beschuss mit streifenden Ionenstrahlen [4]. Auf der Oberfläche wurde ein periodisches Muster mit einer Wellenlänge im Nanometerbereich erzeugt. (c) Abbildung der Pt(111) Oberfläche nach Deposition von 90 Lagen Platin [8]. Die Oberfläche zeigt dreidimensionales Wachstum. (d) Stehende Elektronenwellen in einem Quantenkäfig der aus 48 Eisenatomen auf Cu(111) aufgebaut wurde [3].

Das Rastertunnelmikroskop (engl. Scanning Tunneling Microscope, STM) wurde 1982 von G. Binnig und H. Rohrer erfunden [2] und beide wurden 1986 mit dem Physik Nobelpreis ausgezeichnet. Das Rastertunnelmikroskop macht es möglich, metallische und halbleitende Oberflächen mit atomarer Genauigkeit abzubilden und zu untersuchen. Einer der ersten Erfolge des Rastertunnelmikroskops war die korrekte Beschreibung der Silizium (7×7) Rekonstruktion auf einer (111) Oberfläche von Si(111) (Abb. 1 (a)).

Mit Hilfe des Rastertunnelmikroskops ist es möglich, Schichtwachstum und Schichtmanipulation auf atomarer Skala zu untersuchen [8, 4] [Abb. 1 (b),(c)]. Es besteht ebenfalls die Möglichkeit, einzelne Atome auf der Oberfläche anzurichten und beispielsweise bei Temperaturen von wenigen Kelvin stehende Elektronenwellen in einem Quantenkäfig zu untersuchen [Abb. 1 (d)].

Die meisten Experimente werden heutzutage im Vakuum durchgeführt, damit die Oberflächen ohne störende Adsorbate aus der Luft untersucht werden können. Rastertunnelmikroskopie an Luft ist nur dann möglich, wenn das zu untersuchende Substrat inert ist.

Gegenstand dieses Versuches ist es, die Oberflächen von Graphit, Gold und Tantaldisulfid mittels STM zu untersuchen.

Im Folgenden werden die theoretischen Grundlagen, die zum Verständnis des STM nötig sind, erarbeitet. Der experimentelle Aufbau, wie er im Praktikum vorzufinden ist, wird beschrieben. Die Funktionsweise des STM wird erklärt. Die zu untersuchenden Oberflächen, sowie die Versuchsziele werden anschließend besprochen.

Im Hauptteil sollen Oberflächen mit atomarer Auflösung abgebildet und ein Einblick in die Physik der Versetzungen, Korngrenzen, Ladungsdichtewellen und der Spektroskopie gewonnen werden. Im Anhang ist die STM-Elektronik im Detail beschrieben.

2 Vorbereitung

Voraussetzung für ein erfolgreiches Antestat ist das Verständnis der zentralen Formeln und Konzepte. Dazu soll die Anleitung sorgfältig durchgearbeitet werden.

3 Rastertunnelmikroskopie und -spektroskopie

Um die Rastertunnelmikroskopie und -spektroskopie fachgerecht verstehen zu können, ist es nötig, sich erst einmal mit den theoretischen Grundlagen vertraut zu machen. Das soll in diesem Abschnitt geschehen.

3.1 Tunneleffekt

Die Grundlage für das Rastertunnelmikroskop (im folgenden: STM (Scanning Tunneling Microscope)) ist der quantenmechanische Tunneleffekt.

Sei dazu folgende Situation gegeben:

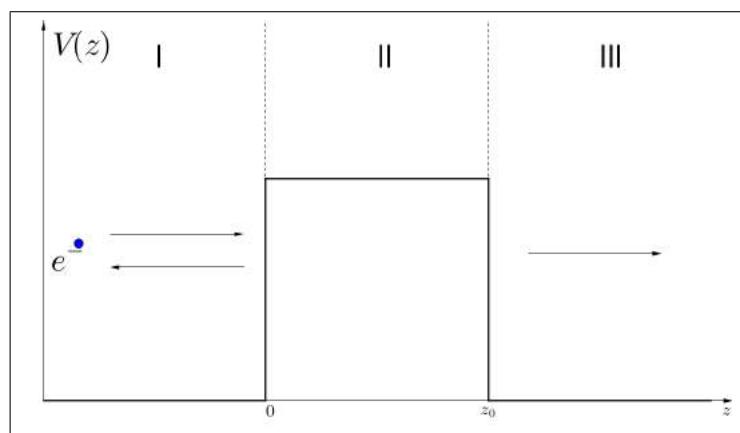


Abbildung 2: Elektron vor Kastenpotential.

In Abb. 2 sind 3 verschiedene Bereiche zu erkennen. Im ersten Bereich (I) befindet sich ein Elektron mit einer bestimmten kinetischen Energie $E_{kin}(e^-)$. Das Potential hat in diesem Bereich den Wert $V = 0$. In dem zweiten Bereich (II) befindet sich ein Kastenpotential mit einer endlichen Höhe, und im dritten Bereich (III) gilt wieder Potential $V = 0$. Um das Kastenpotential zu überwinden, muss im klassischen Fall die kinetische Energie des Elektrons höher sein als das Kastenpotential. Demzufolge können wir zwei verschiedene Fälle unterscheiden:

$$\begin{cases} E_{kin}(e^-) > V(z) & (i) \\ E_{kin}(e^-) < V(z) & (ii) \end{cases}$$

Im zweiten Fall (ii) ist die Energie des Elektrons klassisch gesehen zu gering, um hinter der Potentialstufe beobachtet werden zu können. Friedrich Hund entdeckte jedoch 1926/1927 den später so genannten Tunneleffekt. Das Elektron kann mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit durch das Kastenpotential "hindurch tunneln". Wie ist das zu erklären?

1909 zeigte Albert Einstein, dass Strahlung aus Wellen und Quanten besteht und gilt somit als Begründer des Welle- Teilchen- Dualismus. Demnach besitzen z.B. Elektronen oder Photonen sowohl Eigenschaften von Teilchen als auch von Wellen.

Demnach kann das Elektron nicht nur als klassisches Teilchen, sondern ebenso als Welle beschrieben werden.

In der klassischen Mechanik kann die Energie des Elektrons in einem Kastenpotential durch die folgende Gleichung beschrieben werden.

$$\frac{p_e^2}{2m_e} + V(z) = E$$

p_e entspricht dem Impuls des Elektrons, m_e der Masse und $V(z)$ dem Kastenpotential. Wird das Elektron jetzt aber als Welle betrachtet, so wird es durch eine Wellenfunktion beschrieben. Die Situation kann nun mit der eindimensionalen Schrödinger-Gleichung beschrieben werden, deren Lösungen $\psi(z)$ genau die Wellenfunktionen des Elektrons sind:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2}{dz^2} + V(z) \right) \psi(z) = E\psi(z).$$

$\hbar = 6,582119282 \cdot 10^{-16} \text{ eV} \cdot \text{s}$ bezeichnet das reduzierte Plancksche Wirkungsquantum und E die Energie des Elektrons. Erwin Schrödinger stellte sie 1926 als Wellengleichung auf.

Nun zur Lösung der Gleichung. Durch Umformen kann sie auf die Gestalt

$$\frac{\hbar^2}{2m_e} \psi'' + (E - V(z)) \psi = 0$$

gebracht werden. Dies ist eine homogene Differentialgleichung zweiter Ordnung. Nach [17] muss für die allgemeine Lösung gelten (λ ist der zugehörige Eigenwert des Systems):

$$\frac{\hbar^2}{2m_e} \lambda^2 + (E - V(z)) = 0 \quad (1)$$

$$\Leftrightarrow \lambda_{1,2} = \pm \frac{\sqrt{2m_e(V(z) - E)}}{\hbar} \quad (2)$$

Nun kann die allgemeine Lösung der Differentialgleichung bestimmt werden,

$$\psi(z) = A \cdot e^{\lambda_1 z} + B \cdot e^{\lambda_2 z} \quad (3)$$

die Konstanten A, B müssen dann mithilfe der Randbedingungen angepasst werden.

Nun soll diese allgemeine Lösung an die gegebenen Bedingungen angepasst werden. Zunächst einmal der Bereich (I) und (III). In diesen Bereichen gilt

$$V(z) = 0.$$

Wird diese Bedingung auf (1) angewandt, ergeben sich die Eigenwerte zu

$$\lambda_{1,2} = \pm i \frac{\sqrt{2m_e E}}{\hbar}$$

und als Lösung in diesem Bereich ($k = \frac{\sqrt{2m_e E}}{\hbar}$)

$$\psi_I(z) = A \cdot e^{ikz} + B \cdot e^{-ikz}$$

$$\psi_{III}(z) = C \cdot e^{ikz}$$

Es sind also ebene Wellen, wobei es sich um eine einlaufende und eine auslaufende bzw. reflektierte Welle handelt. In Bereich (III) gibt es nur eine auslaufende Welle.

Wie sieht es aber in dem Bereich (II) der Potentialbarriere aus? Dort gilt

$$V(z) > E$$

und demnach für die Eigenwerte

$$\lambda_{1,2} = \pm \frac{\sqrt{2m_e(V(z) - E)}}{\hbar}$$

Also sieht die Lösung in diesem Bereich etwas anders aus ($\kappa = \frac{\sqrt{2m_e(V(z)-E)}}{\hbar}$)

$$\psi_{II} = A' \cdot e^{-\kappa z} + B' \cdot e^{\kappa z} = A' \cdot e^{-\kappa z}$$

Hierbei wurde bei der Lösung zu λ_2 die Konstante B' gleich 0 gesetzt, da sie sonst physikalisch keinen Sinn machen würde. Wir erhalten also einen exponentiellen Abfall mit der Zerfallskonstante κ . Wie kann dieses Ergebnis nun interpretiert werden?

Die Wellenfunktion selber ist keine Observable, jedoch beschreibt ihr Betragsquadrat die Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Elektronen [21].

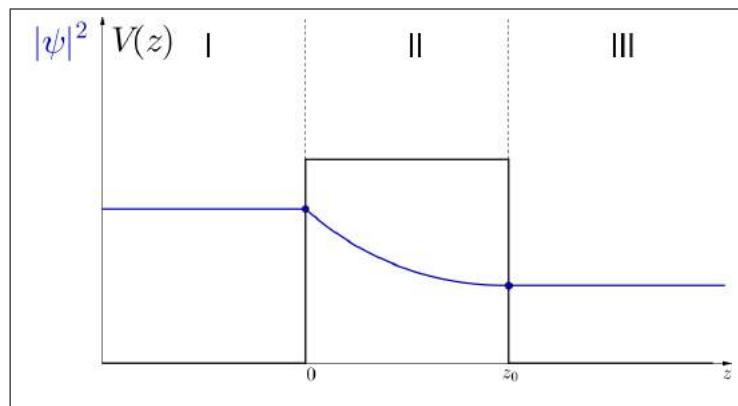


Abbildung 3: Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Elektrons an einem Kastenpotential.

In Abb. 3 ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons skizziert dargestellt. In Bereich (I) und (III) ist sie konstant, während sie in Bereich (II) exponentiell abfällt.

Demnach ist also die Wahrscheinlichkeit $P(z)$ ein Elektron am Punkt z_0 zu messen

$$P(z_0) = |\psi(0)|^2 \cdot e^{-2\kappa z_0}. \quad (4)$$

3.2 Anwendung des Tunneleffekts: Das Rastertunnelmikroskop

Im Folgenden wird betrachtet, wie der Tunneleffekt im STM nutzbar gemacht werden kann. Die Abb. 4 soll dabei unterstützend wirken.

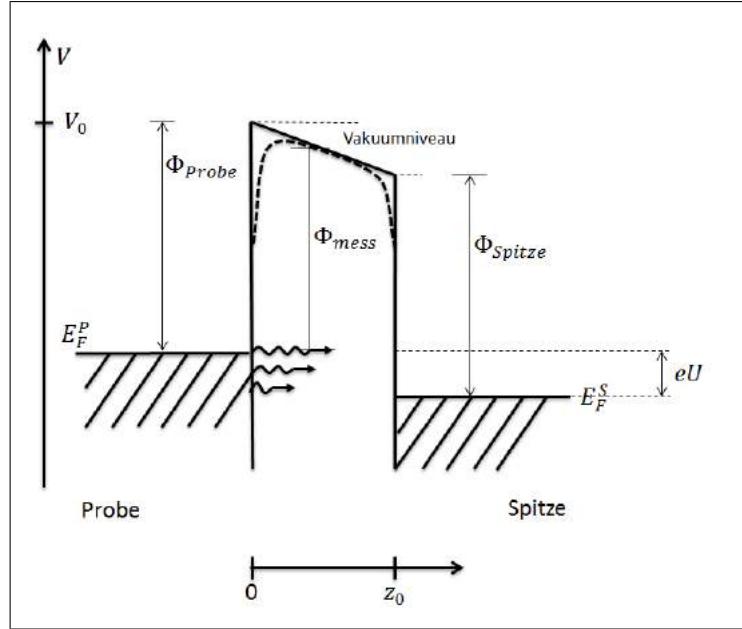


Abbildung 4: Tunneleffekt angewandt auf das STM.

Hierbei wird der Zusammenhang sehr idealisiert dargestellt. Gestrichelt eingezeichnet ist die reale Barrierenhöhe. Im Falle des STMs wird eine metallische Spitze sehr nahe (ca. 10 Å) an die Probe gebracht. Die Tunnelbarriere ist dann abhängig vom Abstand z_0 von Spitz zu Probe. E_F^P bezeichnet das Fermi- Niveau der Probe und besagt, dass bei $T = 0$ K alle Zustände unterhalb dieses Niveaus vollständig besetzt sind und darüber keiner. Die Austrittsarbeits ϕ ist definiert als die minimale Energie, die aufgebracht werden muss, um ein Elektron aus dem Elektronenverbund zu lösen und in das Vakuumniveau zu befördern. Im Allgemeinen sind die Austrittsarbeiten von Spitz und Probe unterschiedlich.

Das Ziel beim STM ist, den Tunnelstrom zwischen der Probe und der Spitz zu messen, und durch die Veränderung Rückschlüsse auf die Beschaffenheit der Probe zu erhalten. Jedoch ist hier kein Strom messbar, da beide auf dem gleichen Fermi- Niveau liegen. Deswegen wird eine positive (negative) Spannung U an die Spitz angelegt. Das bewirkt eine Relativverschiebung der Fermi-Niveaus um $-(+eU)$, und die Elektronen in besetzten Zuständen haben die Möglichkeit in unbesetzte Zustände der Spitz (Probe) zu gelangen. Dabei wird die Energie erhalten (elastisches Tunneln). Es ist also ein Nettostrom messbar.

Wie genau sieht jetzt der Tunnelstrom aus? Die zentrale Aussage des letzten Abschnitts ist, dass die Wahrscheinlichkeit zur Detektion eines Elektrons exponentiell von der Entfernung z_0 abhängt (siehe (4)). Die Anzahl der Elektronen, die tunneln können ist proportional zur Anzahl der Zustände, die sich im Intervall eU befinden. Deswegen ist der Strom proportional zu der Summe über all diese Zustände. Demnach ergibt sich für den Tunnelstrom

$$I \propto \sum_{E_n=E_F-eU}^{E_F} |\psi_n(0)|^2 e^{-2\kappa z_0}.$$

Um dies noch etwas zu vereinfachen, wird die lokale Zustandsdichte $\rho_{Probe}(0, E_F)$ am Fermi- Niveau E_F der Probe betrachtet. Da die angelegte Spannung U klein ist, befinden sich alle Energieniveaus, die in Frage kommen, ganz nahe am Fermi- Niveau. ($\varepsilon > 0$, klein)

$$\rho_{Probe}(0, E_F) = \frac{1}{\varepsilon} \sum_{E_n=E_F-\varepsilon}^{E_F} |\psi_n(0)|^2$$

Damit gilt nun für den Tunnelstrom ($\varepsilon = eU$)

$$I \propto eU\rho_{Probe}(0, E_F) \cdot e^{-2\kappa z_0}. \quad (5)$$

Dies ist der zentrale Punkt bei der Rastertunnelmikroskopie. Der gemessene Tunnelstrom hängt exponentiell vom Abstand der Probe zur Spitze ab. Das bedeutet also, dass selbst eine kleine Änderung des Abstandes eine große Änderung des Tunnelstromes hervorruft.

Als Beispiel soll eine Änderung um $\Delta z = 1 \text{ \AA}$ betrachtet werden. Ein typischer Wert für die Austrittsarbeit ist $\phi = 4 \text{ eV}$. Der Zusammenhang zwischen Austrittsarbeit und κ ist

$$\kappa = \frac{\sqrt{2m_e(V - E)}}{\hbar} = \frac{\sqrt{2m_e \cdot \phi}}{\hbar} = 0,51 \sqrt{\phi(\text{eV})} \text{ \AA}^{-1} \quad (6)$$

Zur Vereinfachung wird der Quotient des Tunnelstromes betrachtet.

$$\frac{I_z}{I_{z+\Delta z}} = \frac{eU\rho(0, E_F) \cdot e^{-2\kappa z}}{eU\rho(0, E_F) \cdot e^{-2\kappa(z+\Delta z)}} = e^{2\kappa\Delta z} = 8,2$$

Der Unterschied beläuft sich also bei einer Änderung des Abstandes um 1 \AA auf einen Faktor 8. Selbst so eine kleine Änderung ist also deutlich in der Änderung des Tunnelstromes wahrnehmbar. Deswegen ist es auch möglich atomare Auflösung zu erreichen.

3.3 Rastertunnelspektroskopie

Mit dem STM ist es aber nicht nur möglich die Topografie der Probe abzubilden, sondern es können noch weitere Informationen über die Probe erlangt werden. Eine Möglichkeit ist die Spektroskopie. Die Funktionsweise ist die folgende: Das STM rastert nicht mehr die Probe ab, sondern wird an einer bestimmten Stelle fixiert. Dabei werden zwei verschiedene Arten von Spektroskopie unterschieden.

1. $I(V)$ - Spektroskopie

Ein Punkt wird fixiert, die Tunnelspannung V verändert und der Tunnelstrom aufgezeichnet. Die Höhe der Spitze bleibt hierbei konstant. Dadurch werden Informationen über die Zustandsdichte erhalten. In dieser Arbeit wird jedoch nicht näher darauf eingegangen.

2. $I(z)$ - Spektroskopie

Ein Punkt wird fixiert, die Spitze nach oben weggezogen und der Tunnelstrom aufgezeichnet. Hier wird dann die Spannung V konstant gehalten. Dadurch ist es möglich, eine Messung der Austrittsarbeit durchzuführen.

I(z)- Spektroskopie:

Wie schon in (5) deutlich wurde, hängt der Tunnelstrom exponentiell vom Abstand ab und es gilt

$$I(z) \propto e^{-2\kappa z}. \quad (7)$$

Für die einzelnen Koeffizienten gilt

$$\kappa = \frac{\sqrt{2m_e(V_0 - E)}}{\hbar} = \frac{\sqrt{2m_e \cdot \phi}}{\hbar}.$$

Zur besseren Veranschaulichung der einzelnen Parameter siehe Abb. 4. Ausgangspunkt sind zwei Materialien, die durch eine Tunnelbarriere getrennt sind. Im vorliegenden Fall handelt es sich um die Spitze des STMs und die zu untersuchende Probe. Idealerweise haben sie die

gleiche Austrittsarbeit (was in der Realität jedoch nicht der Fall ist).

Die Höhe der Tunnelbarriere lässt sich durch die Austrittsarbeit ϕ der einzelnen Materialien beschreiben. Durch die $I(z)$ -Spektroskopie lässt sich demnach ein Näherungswert für die Austrittsarbeit der einzelnen Materialien bestimmen. Hierbei wird ein Mittelwert der Austrittsarbeiten von Probe und Spitze bestimmt (aus [22], S. 30)

$$\phi_{mess} = \frac{\phi_{Probe} + \phi_{Spitze} - eU}{2}.$$

In der Realität werden jedoch Materialien mit unterschiedlicher Austrittsarbeit genutzt. Genauso ist die Annahme einer rechteckigen Tunnelbarriere nur eine Näherung. Zuletzt wird durch thermische Drift und Verunreinigungen aufgrund der Luftatmosphäre die Messung der Austrittsarbeit verfälscht.

Wie wird das Ganze jetzt umgesetzt? Schauen wir uns die zugrundeliegende Gleichung noch einmal genauer an:

$$\begin{aligned} I(z) &\propto e^{-2\kappa z} \\ \Leftrightarrow I(z) &= c \cdot e^{-2\kappa z}. \end{aligned}$$

c bezeichnet die Konstante, die hier nicht weiter betrachtet wird. Später wird auch deutlich, dass dieses für unsere Berechnung auch nicht nötig ist.

Einsetzen von κ (Gl. 6) ergibt

$$\begin{aligned} \Rightarrow I(z) &= c \cdot e^{0.51\sqrt{\phi}z} \\ \Leftrightarrow \ln(I(z)) &= \ln(c) + 0.51 \cdot \sqrt{\phi} \cdot z. \end{aligned}$$

Dabei muss ϕ in eV und z in Å eingesetzt werden. Durch das Auftragen des Logarithmus des Stromes I gegen den Abstand zwischen der Probe und der Spitze z können die Daten mit einer Geraden gefüttet werden, und aus der Steigung kann dann die Austrittsarbeit bestimmt werden.

3.4 Ladungsdichtewellen auf TaS₂

In diesem Punkt soll TaS₂ untersucht werden. Hier gibt es eine große Besonderheit. Bei der Untersuchung der Oberfläche im STM werden nicht nur Atome sichtbar, sondern noch eine andere periodische Struktur, mit einer größeren Wellenlänge als die Atome, siehe Abb. 5. Dabei handelt es sich um Ladungsdichtewellen (engl.: charge density waves, CDW). Und genau mit diesen Ladungsdichtewellen beschäftigt sich der folgende Abschnitt. Die Betrachtung erfolgt nur in einer Dimension. Dazu wird zunächst die Dispersionsrelation eines freien Elektronengases betrachtet, danach an einem eindimensionalen Kristall mit einem periodischen Potential. Dies führt zur Entstehung einer Bandlücke am Rand der ersten Brillouin Zone. Diese Ergebnisse werden dann für die Erklärung der Ladungsdichtewellen genutzt.

Freies Elektronengas:

Für das freie Elektronengas werden Elektronen betrachtet, die sich in einem Volumen befinden. Von einem Elektronengas kann gesprochen werden, wenn sich die Elektronen wie ein klassisches Gas verhalten. Diese Elektronen können nun als Welle beschrieben werden, und dafür nutzen wir die Schrödingergleichung in einer Dimension. Wie schon in Abschnitt 3.1 deutlich wurde, sind die Lösungen $\psi(x)$ ebene Wellen. E_e ist die Energie der Elektronen und k ist der Wellenvektor.

$$\psi(x) = \psi_0 \cdot e^{\pm ikx}, \quad k = \sqrt{\frac{2m_e E_e}{\hbar^2}} \quad ^1$$

¹Die Randbedingung liefert diskrete k_n -Werte, doch für große Proben ist δk sehr klein.

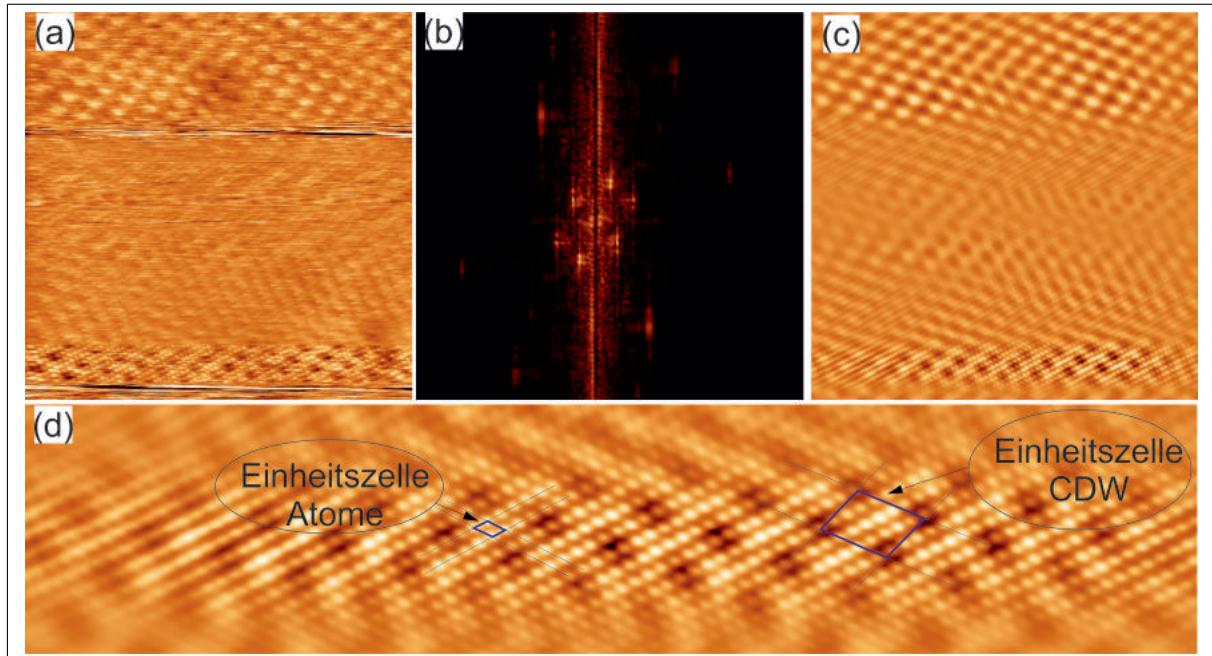


Abbildung 5: (a) Ladungsdichtewellen und atomare Auflösung auf TaS_2 bei $I = 3 \text{ nA}$ und $U_{\text{Bias}} = 8,8 \text{ mV}$, Bildgröße $28 \text{ nm} \times 28 \text{ nm}$. Es sind einige Spaltenwechsel zu sehen. (b) Fourier-Transformierte von (a), zu erkennen sind die Peaks der Ladungsdichtewellen nahe am Mittelpunkt und die Peaks der atomaren Auflösung weiter außen. (c) Mittels der Fourier-Transformation gefiltertes Bild von (a). (d) Unterer ausschnitt aus (C), $27,1 \text{ nm} \times 5,8 \text{ nm}$ Größe. Eingezeichnet sind jeweils die Einheitszelle der atomaren Auflösung, sowie die Einheitszelle der Ladungsdichtewellen

Der Impuls einer Welle ist definiert als

$$p = \hbar k.$$

Nun kann die Energie in Abhängigkeit des Wellenvektors geschrieben werden

$$E_e = \frac{p^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2}{2m_e} \cdot k^2.$$

Durch das Auftragen der Energie gegen den Wellenvektor erhält man die Dispersionsrelation.

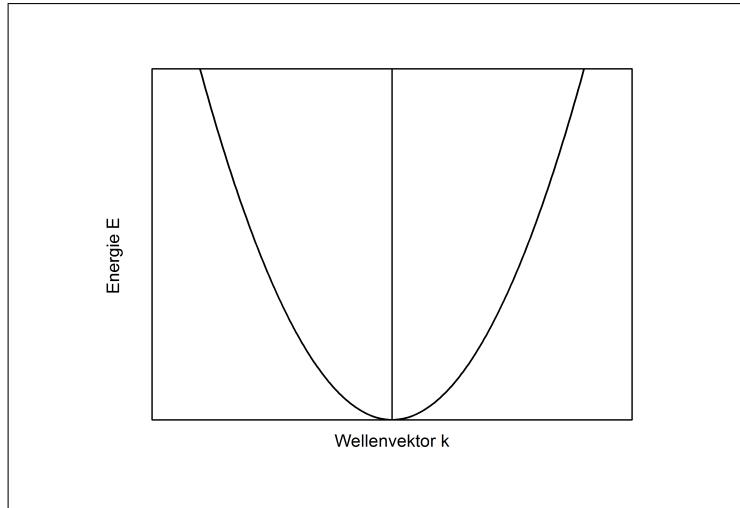
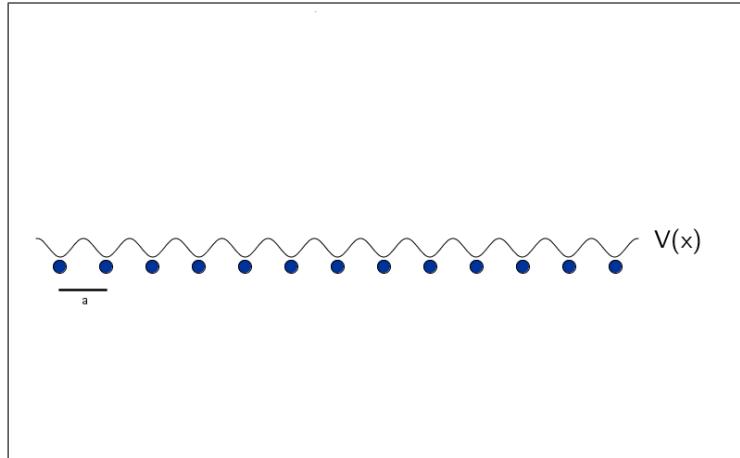


Abbildung 6: Dispersionsrelation eines freien Elektronengases.

Eindimensionaler Kristall im Elektronengas:

Nun wird ein 1D Gitter mit Gitterkonstante a angenommen, wobei genau N Atome auf den Gitterpunkten und N Elektronen in dem Elektronengas vorhanden sind.

Abbildung 7: Periodisches Potential $V(x)$ an 1D Atomkette.

Dadurch entsteht ein periodisches Potential $V(x)$. Durch die Annahme, dass es sich um ein schwaches Potential handelt, verhalten sich die Elektronen näherungsweise noch immer wie im freien Elektronengas.

Die Schrödinger-Gleichung für diesen erweiterten Fall sieht dann etwas anders aus.

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2}{dx^2} \psi + V(x) \psi = E_e \psi$$

Die Lösungen dieser Gleichung sind nach dem Bloch-Theorem² Blochwellen der Gestalt

$$\psi(x) = u_{k'}(x) e^{ik' x}, \quad u_{k'}(x) = u_{k'}(x + a),$$

²Es sei ein periodisches Potential $V(\vec{r})$ mit der Periodizität \vec{R} gegeben, $V(\vec{r}) = V(\vec{r} + \vec{R})$. Dann haben die Lösungen der stationären Schrödinger-Gleichung notwendigerweise die Form $\psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} \cdot u_{\vec{k}}(\vec{r})$, wobei $u_{\vec{k}}(\vec{r})$ eine periodische Funktion mit Periode \vec{R} ist ($u_{\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R})$) und \vec{k} ist ein Punkt des reziproken Raumes, der mit der Periodizität von $u_{\vec{k}}(\vec{r})$ übereinstimmt. (Aus [12]).

wobei k' Punkte des reziproken Raumes sind und die Periode von $u_{k'}(x)$ mit diesen Punkten übereinstimmt. Zur einfacheren Schreibweise sei im Folgenden wieder $k' = k$.

Was ist nun der reziproke Raum \mathfrak{R} ? Er ist folgendermassen definiert:

\mathfrak{R} ist der Raum der Wellenvektoren k , deren zugehörige Welle $\psi_k(x)$ in der Periodizität mit der des Gitters übereinstimmt.

Mathematisch ist es die folgende Menge: ($x \in G$ ist ein Gittervektor)

$$\mathfrak{R} = \{k \in \mathbb{Z} : \psi_0 \cdot e^{ikx} = \psi_0 \cdot e^{ik(x+na)}, n \in \mathbb{Z}, \psi_0 \text{ fest}, x \in G\}.$$

Wie genau sehen die Elemente des reziproken Raumes aus? Es gilt

$$\begin{aligned} e^{ikx} &= e^{ik(x+na)} \\ \Leftrightarrow e^{ikna} &= \cos(kna) + i \sin(kna) = 1 \\ \Leftrightarrow ka &= 2 \frac{\hat{n}}{n} \pi = 2n' \pi, \quad n' := \frac{\hat{n}}{n} \in \mathbb{Z} \\ \Leftrightarrow k &= \frac{2n' \pi}{a}. \end{aligned}$$

Das kleinste k (abgesehen von $k = 0$) ergibt sich bei $n = 1$, also $k_{min} = \frac{2\pi}{a}$. Die Gitterpunkte im reziproken Raum sitzen also bei $0, \frac{2\pi}{a}, \frac{4\pi}{a}, \dots$, vgl. Abb. 8.

Als nächstes soll die Wigner-Seitz-Zelle im reziproken Raum betrachtet werden. Dies ist die primitive Einheitszelle. In 1D besteht sie aus den k - Vektoren des Intervalls $[-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}]$. Die Wigner Seitz Zelle des Reziproken Gitters nennt man auch **erste Brillouin-Zone**. Laut der Definition wiederholt sich die gesamte Struktur des Raumes danach periodisch. Das bedeutet, es genügt nur diese Zone zu betrachten. Zur besseren Veranschaulichung siehe Abb. 8 der Dispersionsrelation mit dem periodischen Potential in 1D.

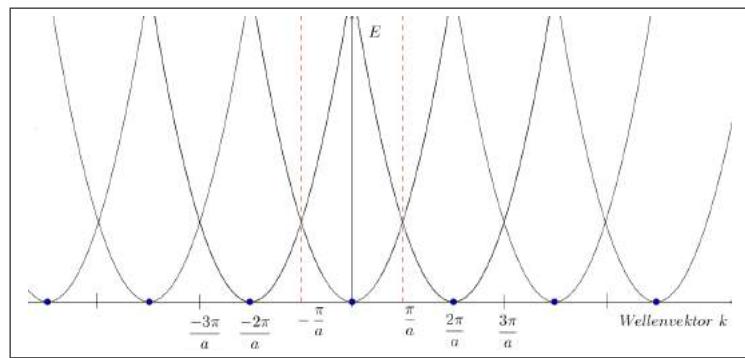


Abbildung 8: Dispersionsrelation für ein periodisches Potential in 1D, die gestrichelte Linie kennzeichnet die erste Brillouin-Zone, die Punkte sind die Gitterpunkte im reziproken Raum.

Jeder Punkt kann durch Translation um einen reziproken Gittervektor $g \in \mathfrak{R}$ wieder in die erste Brillouin-Zone transformiert werden, die nun in Abb. 9 dargestellt ist.

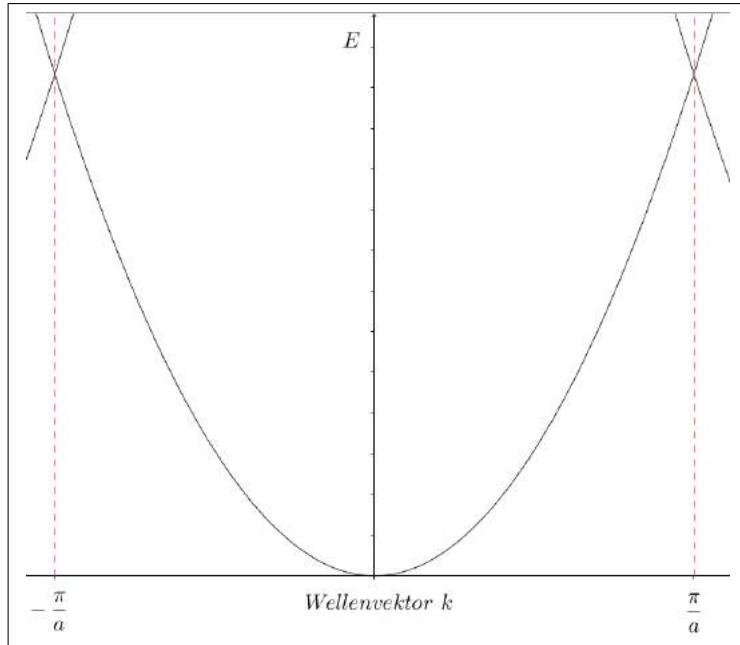


Abbildung 9: Erste Brillouin-Zone.

Diese Darstellung ist aber noch nicht ganz richtig. Die Punkte denen sich nun die Aufmerksamkeit widmet, sind die Schnittpunkte der beiden Graphen am Rand der ersten Brillouin-Zone. Was genau passiert dort?

Dazu betrachten wir noch einmal die Schrödinger-Gleichung. Deren Lösungen am Rand der ersten Brillouin-Zone sind

$$\psi_1(x) \propto e^{i\frac{\pi}{a}x}, \quad \psi_2(x) \propto e^{-i\frac{\pi}{a}x}.$$

Da diese beiden Lösungen linear unabhängig sind und die Schrödinger-Gleichung eine Differentialgleichung zweiter Ordnung ist, wird durch die Linearkombination der beiden Lösungen die allgemeine Lösung erhalten (siehe [17], S. 38).

Diese kann nun in 2 Fälle aufgeteilt werden. Diese beiden werden einmal ψ_+ und ψ_- genannt.

$$\psi_+ \propto e^{i\frac{\pi}{a}x} + e^{-i\frac{\pi}{a}x} \propto \cos\left(\frac{\pi}{a}x\right)$$

$$\psi_- \propto e^{i\frac{\pi}{a}x} - e^{-i\frac{\pi}{a}x} \propto \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right).$$

Für die Aufenthaltswahrscheinlichkeit gilt dann:

$$|\psi_+|^2 \propto \cos^2\left(\frac{\pi}{a}x\right), \quad |\psi_-|^2 \propto \sin^2\left(\frac{\pi}{a}x\right)$$

Die Aufenthaltswahrscheinlichkeiten der beiden Lösungen sind stehende Wellen. Die folgende Abb. 10 zeigt den Zusammenhang zwischen Gitter, dem Potential und den beiden Lösungen.

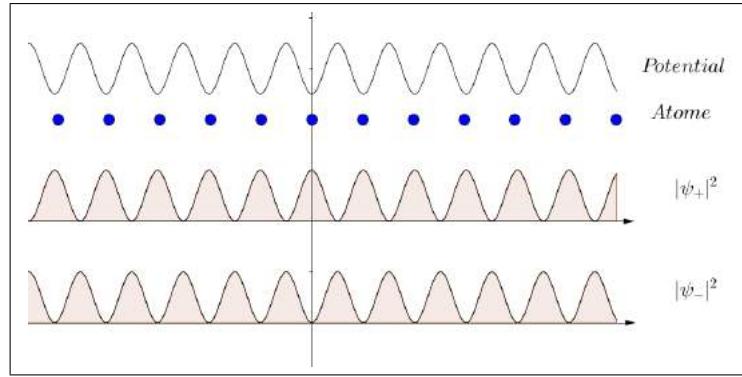


Abbildung 10: Gitter und stehende Wellen.

Es existieren an den Rändern der ersten Brillouin-Zone also zwei verschiedene Lösungen, die nicht entartet sind. Aufgrund der Coulomb- Wechselwirkung der Elektronen mit den Atomrumpfen muss die Energie des einen Zustandes (ψ_+) kleiner sein als die des anderen (ψ_-):

$$E(\psi_+) < E(\psi_-).$$

Daher muss sich eine Energiefülle am Rand der ersten Brillouin-Zone öffnen. Dies kann auch noch durch ein anderes Phänomen erklärt werden. Die Gruppengeschwindigkeit stehender Wellen an Knotenpunkten ist gleich null, also

$$v = \frac{1}{\hbar} \nabla_k E(k) = 0.$$

Dies impliziert, dass die Steigung an den Knotenpunkten gleich Null ist. Also muss sich dort eine Energiefülle befinden. Die erste Brillouin-Zone ist nun korrekt in Abb. 11 dargestellt.

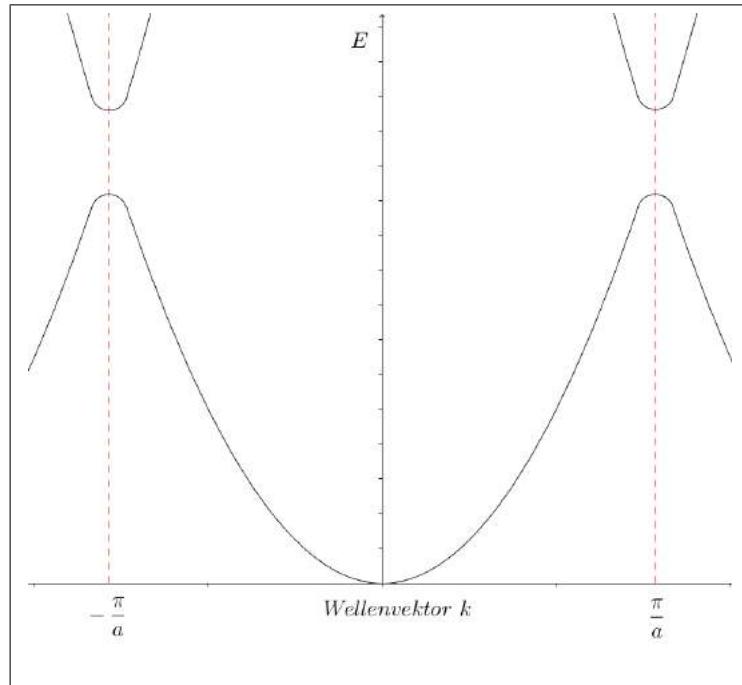


Abbildung 11: Erste Brillouin Zone 1D.

Der Graph vor und nach der Lücke wird nun als Band bezeichnet, es sind die verschiedenen diskreten k - Vektoren, die zu den Zuständen der Elektronen gehören.

Entstehung von Ladungsdichtewellen in 1D:

Nachdem nun einige Grundlagen gelegt wurden, ist es jetzt möglich das Phänomen der Ladungsdichtewellen zu erklären. Dazu werden folgende Annahmen getroffen:

- 1D-Kristall.
- N Atome, N Elektronen, demnach ist das Band halb gefüllt (in Abb. 12 blau).

Wichtige Begriffe:(siehe Abb. 12)

- Fermi-Energie: Die Energie bis zu der bei $T = 0$ K alle Zustände vollständig besetzt sind, und danach keiner mehr.
- Fermifläche: Die Grenze im k - Raum zwischen besetzten und unbesetzten Zuständen (bei $T = 0$ K). In 1D entspricht diese zwei Punkten.

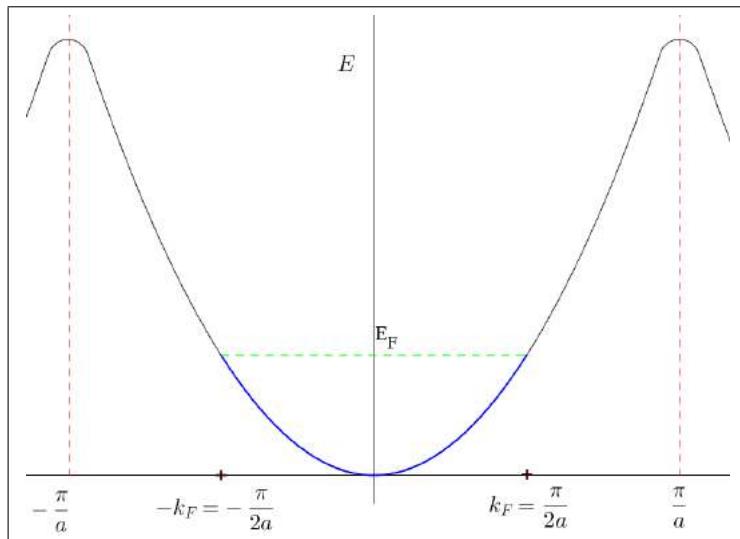


Abbildung 12: Erste Brillouin Zone, in blau die besetzten Zustände.

Sei nun folgende Situation gegeben: Die Atome des 1D-Gitters werden etwas zueinander verschoben, was einer eingefrorenen Gitterschwingung entspricht.

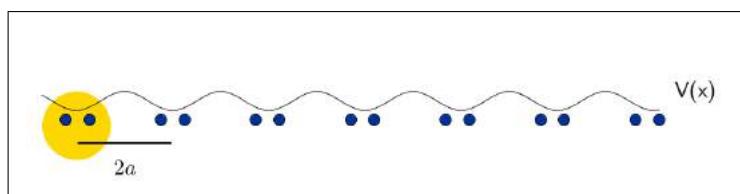


Abbildung 13: verzerrtes 1D-Gitter.

Diese Verzerrung entspricht in der Realität ca. 1 %, in der Abbildung ist sie zur besseren Veranschaulichung sehr viel größer. Damit ändert sich die Gitterkonstante. Das komplette Gitter wird nun dargestellt durch eine 2-atomige Basis (gelb in Abb. 13) mit der Gitterkonstanten $2a$. Es entsteht nun eine neue Brillouin-Zone bei $\pm \frac{\pi}{2a}$, also genau am Fermi- Niveau, da wir ja ein halb gefülltes Band angenommen hatten.

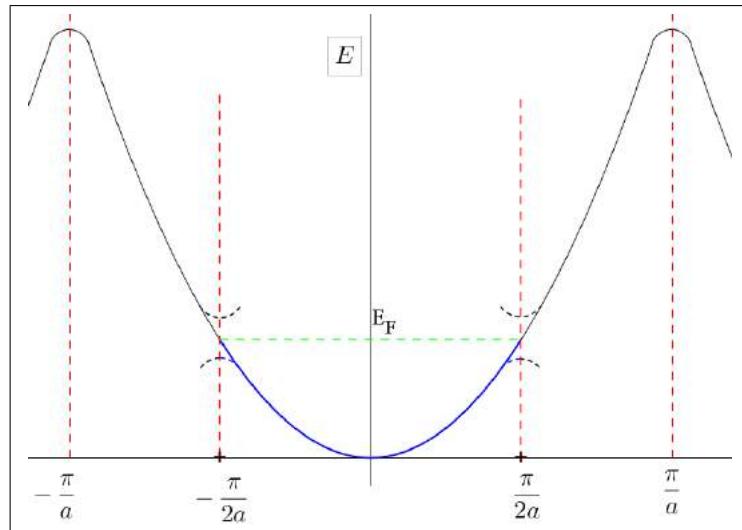


Abbildung 14: Neue Brillouin-Zone.

Nach den obigen Überlegungen entsteht am Rand der neuen Brillouin-Zone nun wieder eine Bandlücke.

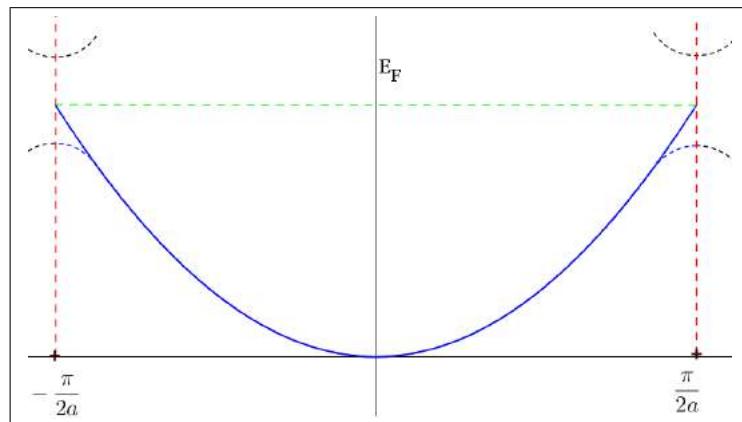


Abbildung 15: Neue Brillouin-Zone, Energie der Elektronen nahe der Fermi-Energie wird abgesenkt.

Vergleicht man die Energie der Elektronen vor und nach der Verschiebung, so erkennt man, dass die Energie der Elektronen unterhalb der Fermi-Energie abgesenkt wird, und somit auch die Gesamtenergie unseres 1D-Systems (siehe Abb. 15, blau). Dies liegt daran, dass die neue Energielücke genau an der Fermi-Energie entsteht. Ist dieser Energiegewinn größer als die Energie, die für die Gitterverzerrung benötigt wird, so wird sich ein 1D Kristall immer entsprechend verzerren. Dieses Phänomen nennt man auch **Peierls-Instabilität** (nach Rudolf Peierls).

Dies ist die Ursache für die Ladungsdichtewellen im 1D Fall. Generell gilt: Wenn die Energie, die bei der Erzeugung der Bandlücke gewonnen wird, größer ist als die Energie, die zur Verschiebung der Atome benötigt wird, so findet dieser Prozess statt. Es ist nun eine Modulation in der Zustandsdichte der Elektronen zu sehen welche hoch ist, wenn die Bandkrümmung klein ist. Um diese im STM sichtbar zu machen, muss die Spannung so eingestellt werden, dass man sich in der Nähe von E_F befindet. In der Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Elektronen, die sich dort befinden, ist dann die Verzerrung sichtbar.

Intuitiv würde man meinen, die Verschiebung der Atome auch im STM-Bild zu sehen. Diese ist jedoch nur so klein (ca. 1%), dass sie nicht wahrgenommen werden kann.

Damit sich eine Bandlücke an der Fermi-Energie öffnen kann, muss die neue, durch die Verzerrung entstandene Brillouin-Zone die richtige Größe haben. In unserem 1D-Fall also gerade halb so groß wie die alte Brillouin-Zone. Damit hat sich die Periodizität im reziproken Raum halbiert, die neue Brillouin-Zone hat die Breite $k_{nesting} = \pi/a$. Im Realraum ergibt sich also die Wellenlänge der Ladungsdichtewelle λ_{CDW} zu

$$\lambda_{CDW} = \frac{2\pi}{k_{nesting}} = \frac{2\pi}{2k_F} = \frac{\pi}{k_F}$$

$k_{nesting}$ wird auch als Nesting-Vektor bezeichnet.

Entstehung von Ladungsdichtewellen in 2D:

Nun soll anschaulich anhand des oben beschriebenen 1D-Modells eine Erklärung der Ladungsdichtewellen an der Oberfläche eines 3D Kristalls gegeben werden. Entscheidend für die Entstehung der Ladungsdichtewellen ist, dass sich eine Bandlücke an der Fermi-Energie öffnet. Dadurch wird die Energie der Elektronen nahe der Fermi-Energie herabgesenkt, so dass insgesamt ein Energiegewinn zu verzeichnen ist. Wenn dieser höher ist als die Energie die zur Gitterverzerrung nötig ist, dann wird der Prozess stattfinden und es entstehen Ladungsdichtewellen. Somit ist für Kristalle höherer Dimensionen entscheidend, wie die Symmetrie der Fermi-Fläche ist. Bei z.B. einer runden Fermi-Fläche eines kubischen Gitters, zeigen mögliche Nesting-Vektoren in unterschiedliche Richtungen. Es gibt demnach keine bevorzugte Richtung, in der sich die Atome verschieben könnten, um so eine Energilücke an der Fermi-Energie zu öffnen. Wenn es sich jedoch z.B. um eine quadratische Fermi-Fläche handelt, so sind die x- und y-Richtung bevorzugt, weil es sehr viele Nesting-Vektoren gibt, die parallel in die gleiche Richtung zeigen.

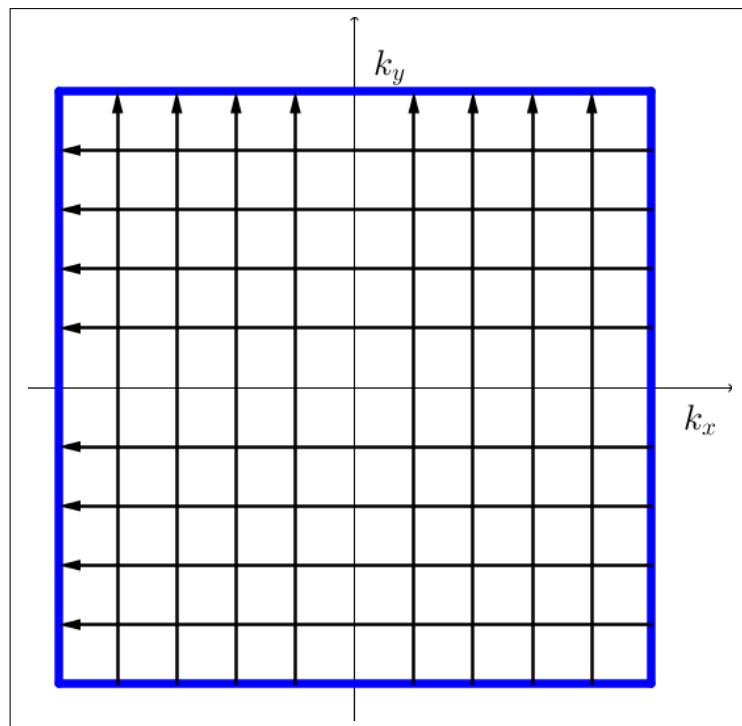


Abbildung 16: Quadratische Fermi-Fläche (blau) mit Nesting-Vektoren.

Demnach kann sich ein kubisches Gitter folgendermaßen verzerrn:

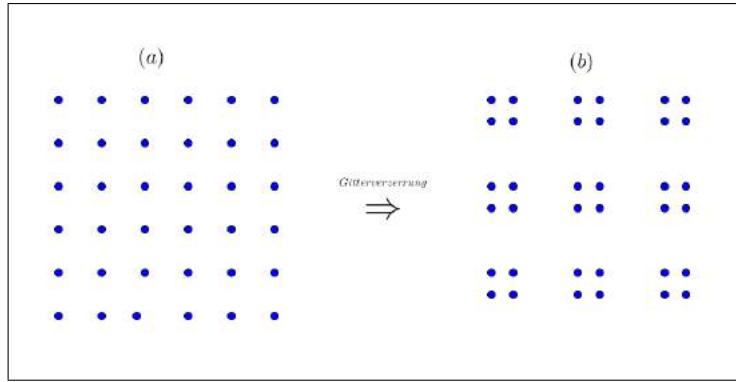


Abbildung 17: Kubisches Gitter, (a) vor der Gitterverzerrung, (b) nach der Gitterverzerrung.

An diesem Beispiel soll deutlich werden, dass es an der Symmetrie der Fermi-Fläche eines Materials liegt, ob es möglich ist die freie Energie durch eine Gitterverzerrung herabzusenken. Der Wellenvektor dieser Gitterverzerrung muss die Fermifläche treffen damit sich eine Lücke genau an der Fermi-Energie öffnet und ein Energiegewinn zu verzeichnen ist (siehe Abb. 15). Hat die Fermi-Fläche nun eine hohe Symmetrie, so kann ein einzelner Wellenvektor $k_{nesting}$ einen großen Teil der Fermi-Fläche erreichen. In diesem Fall ist es dann energetisch günstig das Gitter zu verzerrn. Die Energie, die dabei gewonnen wird ist höher als die Energie die bei der Gitterverzerrung aufgebracht werden muss.

Durch die Gitterverzerrung ändert sich die elektronische Zustandsdichte, und es sind Ladungsdichtewellen vorhanden. Diese können dann mit dem STM sichtbar gemacht werden, wenn sich die Zustände nahe der Fermi-Energie angeschaut werden (kleine Spannungen, ca 10 mV). Die Fermi- Fläche von TaS_2 hat die folgende Gestalt:

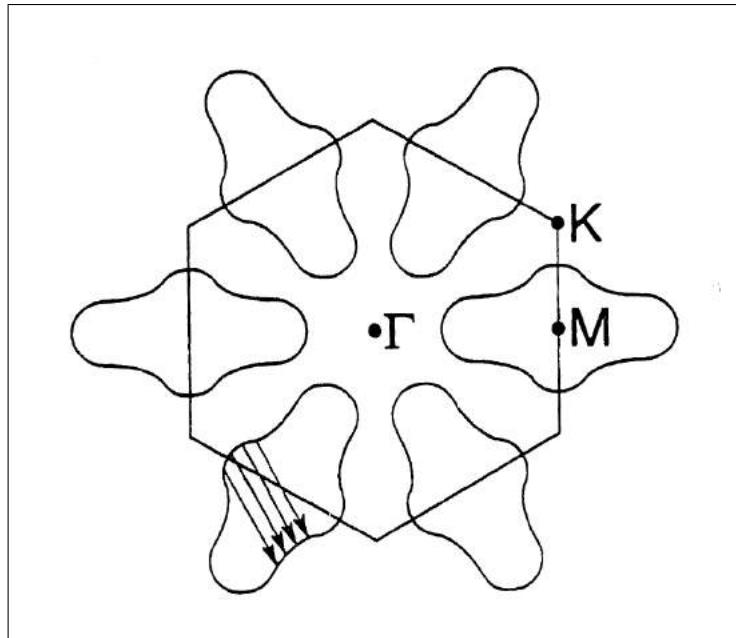


Abbildung 18: Fermi-Fläche TaS_2 aus [20], eingezeichnet sind die Nesting-Vektoren, die für die Ladungsdichtewellen verantwortlich sind.

3.5 Proben

Hochorientiertes pyrolytisches Graphit:

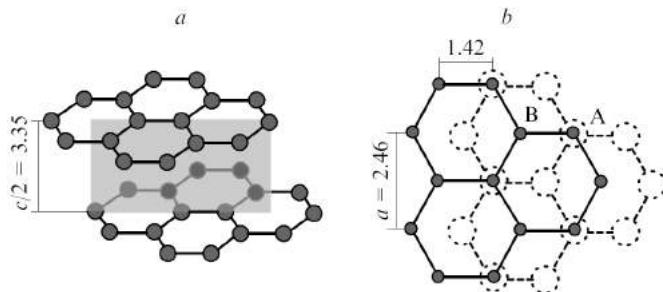


Abbildung 19: Kristallstruktur von hochorientiertem pyrolytischen Graphit (HOPG) [10]

Hochorientiertes pyrolytisches Graphit besteht aus Kohlenstoffatomen, die in einer Wabenstruktur aufgebaut sind (Abb. 19 (a)). Die Gitterkonstante von Graphit beträgt $a = 2,4612 \text{ \AA}$ und der nächste Nachbarabstand $1,42 \text{ \AA}$. Innerhalb einer Lage liegt eine sp^2 -Hybridisierung der Atome vor, während die Verbindung zwischen den Lagen nur durch schwache van der Waals Kräfte zustande kommt. Zwei Lagen sind immer so gegeneinander verschoben, dass ein Atom der untersten Lage in der Mitte der darüberliegenden Wabe liegt (Abb. 19 (b)). Dies führt dazu, dass drei der sechs Atome in einem Ring ein direktes Nachbaratom in der darunterliegenden Lage besitzen (Abb. 19 (b)). Die Stapelfolge des HOPG ist dementsprechend ABAB mit einem Lagenabstand von $3,35 \text{ \AA}$.

Da die Bindung der einzelnen Graphitlagen nur schwach ist im Vergleich zur Bindung innerhalb einer Lage, kann eine saubere Oberfläche durch folgende Methode erzeugt werden. Ein Stück Klebeband wird auf das Substrat aufgeklebt. Es ist dabei zu beachten, dass sich unterhalb des Klebebandes keine Luftblasen gebildet haben. Anschließend wird das Klebeband langsam und vorsichtig abgezogen, wodurch man eine Lage Graphit vom Substrat löst. Man erhält somit eine Oberfläche, die zunächst frei von Verunreinigungen ist.

Gold auf Glimmer:

In diesem Versuchsteil soll eine dünne Goldschicht auf Glimmer untersucht werden. Glimmer ist ein Mineral, das in vielen verschiedenen Formen erhältlich ist. In diesem Fall wird Muskovit Glimmer verwendet, das lagenförmig aufgebaut ist. Innerhalb einer Lage besteht das Mineral aus Aluminiumsilikat und die einzelnen Lagen werden durch Kaliumionen schwach gebunden ($\text{K Al}_2[\text{AlSi}_3\text{O}_{10}(\text{OH})_2]$). Das Material kann deshalb gespalten werden und dabei entsteht eine sehr glatte Oberfläche. Das Substrat musste erst im Vakuum ausgegastet werden und anschließend wird Gold thermisch verdampft, so dass sich eine Goldschicht auf dem Substrat abscheidet. Durch anschließendes Glühen des Substrates kann die Struktur geglättet und gesäubert werden. Die Schicht besteht dann aus unterschiedlich orientierten Körnern, die aber alle ihre (111) Ebenen parallel zur Oberfläche haben. Es ist eine [111] texturierte, polykristalline Au-Schicht. Die Oberfläche wird also durch (111) Terrassen gebildet, die durch monoatomar hohe Stufenkanten getrennt werden.

Als Korngrenze bezeichnet man die Trennung von Bereichen gleicher Kristallstruktur aber unterschiedlicher Orientierung

Sie können zwei Arten von Stufenkanten unterscheiden. Geschwungene Stufenkanten und Stufenkanten, die exakt längs bestimmter Richtungen verlaufen, die um 120° zueinander ver-

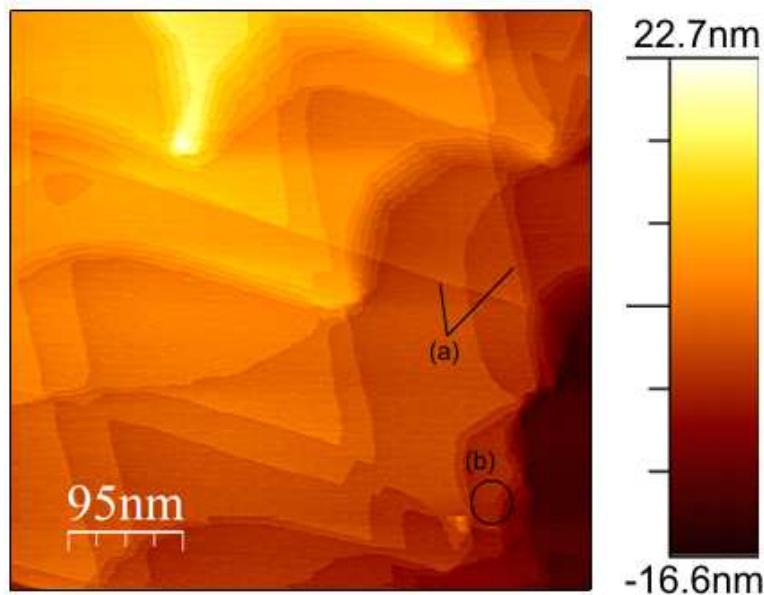


Abbildung 20: Rastertunnelmikroskopie Aufnahme der Gold Oberfläche. I= 1nA, U= 1V.

setzt sind. Letztere Stufenkanten verlaufen entlang der $<110>$ -Richtungen. Beim Abkühlen nach dem Ausglühen der Goldschicht wandern aufgrund thermischer Spannungen Versetzungen durch die Schicht. Als Versetzung bezeichnet man die linienförmige Störung des perfekten Kristallaufbaus (vgl. B Praktikum B2.8). Eine Versetzung entsteht dort, wo eine Ebene im Kristall endet. Die Begrenzungslinie dieser Teilebene bezeichnet man als Stufenversetzung (siehe [6] S. 622). Man kann sich Versetzungen auch so vorstellen, dass man einen perfekten Kristall teilweise entlang einer Ebene aufschneidet, ihn senkrecht zur Begrenzungslinie verschiebt und anschließend wieder zusammenbaut. Es entsteht eine Stufenversetzung. Verkippt man den Kristall nicht senkrecht sondern parallel zur Begrenzungslinie, so entsteht eine Schraubenversetzung (siehe [6] S. 623).

Versetzen wandern in fcc-Kristallen auf $\{111\}$ Ebenen. Wandert nun der Endpunkt einer Schraubenversetzung aufgrund thermischer Spannung über die Oberfläche, so wandert dieser Punkt auf der Schnittlinie zweier $\{111\}$ -Ebenen. Diese Schnittlinie ist eine $<110>$ -Richtung. Daher sehen Sie exakt in $<110>$ -Richtungen orientierte Stufen (Abb. 20 (a)).

Außerdem können auch Durchstoßpunkte von Schraubenversetzungen zu sehen sein, die sich dadurch auszeichnen, dass eine Stufenkante an einer Stelle der Oberfläche beginnt (Abb. 20(b)).

Das Glättungs-und Reinigungsverfahren wird mit Hilfe eines Heissgasbrenners durchgeführt. Die Probe wird in eine Pinzette eingeklemmt und mit Hilfe eines Kupferblocks auf dem Tisch fixiert. Das Labor wird abgedunkelt und das Substrat wird langsam erhitzt. Sobald das Substrat dunkelrot glüht, muss mit dem Heizen aufgehört werden und das Substrat wird anschließend auf den Kupferblock gelegt, damit es möglichst schnell abkühlt. Die Probe kann nun in den Probenhalter gespannt und abgebildet werden.

Goldblech:

Bei dem Goldblech handelt es sich um ein Blech von 1 cm x 1 cm x 0,3 cm Größe, das zu 99.9% aus Gold besteht. Es liegt polykristallin vor, und die Textur ist nicht so stark ausgeprägt wie bei der Goldschicht auf Glimmer. Man findet neben Körnern mit (111)-Terrassen

auch Körner, die andere Oberflächenorientierungen aufweisen. Um die Oberfläche zu reinigen und zu glätten wurde es bei 700°C in 10% Wasserstoff geäglüht, sowie eine längere Zeit von Hand poliert.

Das Goldblech wird ebenso wie das Gold auf Glimmer mittels des Heizgasbrenners erhitzt um die Oberfläche zu reinigen. Gegebenenfalls kann es noch vorher von dem Versuchsbetreuer über Nacht im Ofen bei 700°C geäglüht werden, um die Terrassen weiter auszubilden.

TaS₂ :

TaS₂ gehört zu den sogenannten 2D-Materialien.

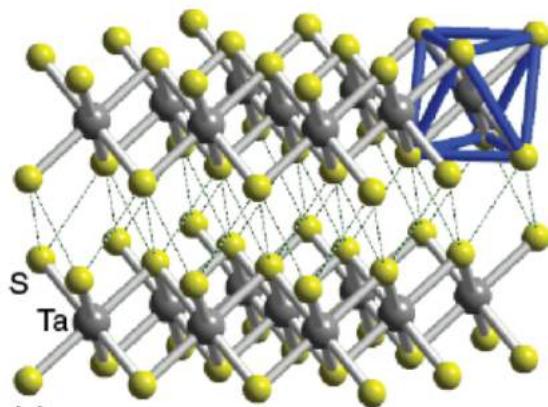


Abbildung 21: Kristallstruktur von TaS₂, aus [19].

Zu erkennen ist, dass jede Lage aus drei Unterlagen besteht. In der Mitte befindet sich eine Lage Tantal-Atome, darüber und darunter jeweils eine Lage Schwefel-Atome. Innerhalb dieses 3-Lagen-Sandwich sind die Atome mittels kovalenter Bindung gebunden. Die einzelnen Lagen sind durch van der Waals-Bindungen gebunden, die deutlich schwächer sind. Aufgrund dieser Eigenschaft ist es genauso wie beim Graphit möglich dieses Material zu spalten.

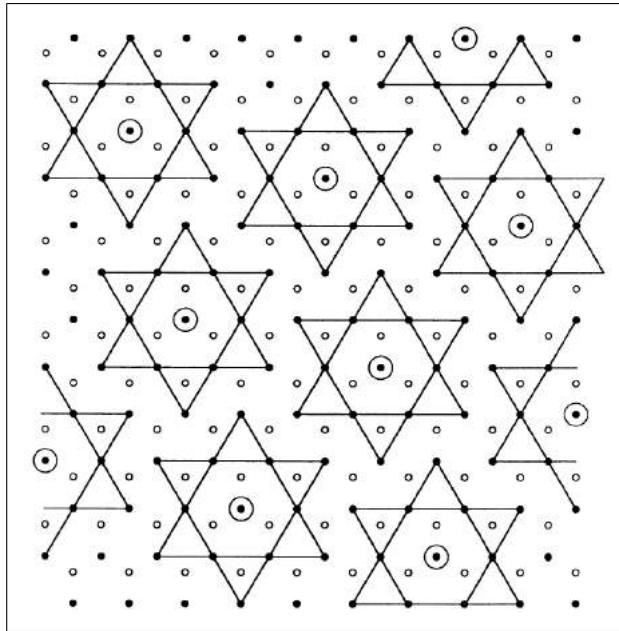


Abbildung 22: Oberfläche von TaS_2 , aus [20]. Die gefüllten Punkte repräsentieren die Tantal-Atome, die offenen Punkte die Schwefel-Atome. Die eingezeichneten Sterne sind die Tantal-Atome, die sich für ein CDW-Maxima verschieben.

Jede einzelne Lage besteht aus einer hexagonal dichten Kugelpackung. Die verwendete Probe ist $1T - TaS_2$.

Das Substrat muss grundsätzlich nicht präpariert werden, wenn die Ergebnisse nicht gut sind, kann es vom Betreuer neu abgezogen werden.

4 Versuchsaufbau

Der Versuchsaufbau ist schematisch in Abb. 23 skizziert. Das Rastertunnelmikroskop besteht aus vier Piezokeramiken. Drei davon sind in einem Winkel von 120° angeordnet (Abb. 23(c)). In der Mitte befindet sich ein weiteres Piezo, in dem eine Metallspitze, die Tunnelspitze, steckt. Die Funktionsweise der einzelnen Piezos wird in Abschnitt 4 erläutert. Auf den drei äußeren Piezokeramiken (im Folgenden auch Piezobeine genannt) sind kleine Halbkugeln aufgeklebt. Ein Probenhalter, der in Abbildung 23 (d),(e) zu sehen ist, kann auf die Piezobeinchen abgesetzt werden. In der Mitte des Probenhalters ist die zu untersuchende Probe angebracht. Das Mikroskop liegt auf mehreren Edelstahlplatten, die durch Viton, einen dämpfenden Kunststoff, voneinander getrennt sind. Dies ist notwendig, damit das Rastertunnelmikroskop nicht durch mechanische Schwingungen aus der Umgebung gestört wird.

Wie vorhin erläutert ist es notwendig, eine elektrische Spannungsdifferenz zwischen Probe und Spalte anzulegen, damit ein Tunnelstrom fließt. Im Praktikumsversuch kann ein Potential von bis zu $\pm 10V$ an die Probe angelegt werden, die Spitze ist auf Erdpotential. Der Tunnelstrom wird durch einen Vorverstärker, der nahe am Mikroskop angebracht ist, verstärkt und in eine Spannung umgewandelt. Der Verstärkungsfaktor liegt in diesem Fall bei $1 \cdot 10^9$ V/A. Dies ist notwendig, damit das Signal schaltungstechnisch weiterverarbeitet werden kann. Der Tunnelstrom wird mit einem Sollwert verglichen, den man in der Steuersoftware einstellen kann. Weicht der gemessene Wert vom Sollwert ab, so wird über eine Regelschleife die Spannung am z-Piezo so verändert, dass Soll- und Istwert identisch sind. Die Regelspannung des z-Piezos wird anschliessend vom PC ausgelesen.

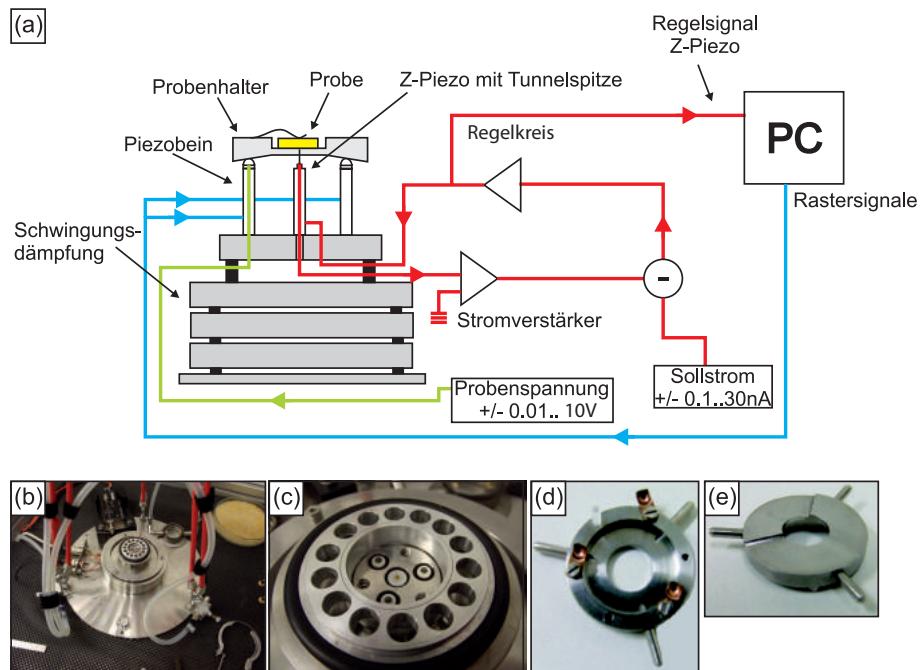


Abbildung 23: (a) Schematischer Aufbau des Rastertunnelmikroskops. (b) Photo des Rastertunnelmikroskops mit Schwingungsdämpfung und z-Translator zum Absetzen des Probenhalters auf den STM Beinchen. (c) Photo der Piezoelemente (Draufsicht). (d),(e) Probenhalter

Das Messsignal ist die Regelspannung des z-Piezos.

Der Tunnelstrom wird konstant gehalten. Diese Messmethode bezeichnet man als "constant current" Mode. Eine Unebenheit auf dem Substrat führt durch die sehr starke Abstandsempfindlichkeit des STM zu einer Veränderung des Tunnelstromes. Um den Strom auszugleichen, muss die Spannung am z-Piezo so verändert werden, dass der Abstand wieder gleich ist. Dies ist in Abbildung 24 skizziert.

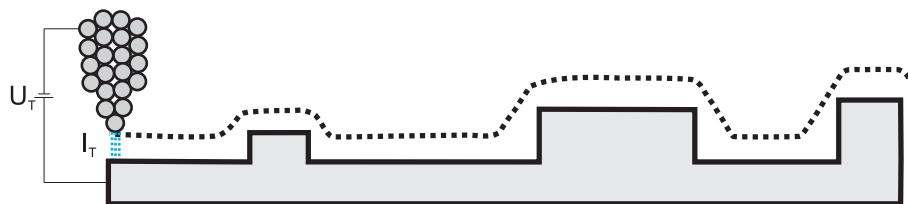


Abbildung 24: Skizze des constant current Modus des STMs. Die Spitze folgt wegen der extremen Abstandsabhängigkeit der Spitze jeder Änderung in der Zustandsdichte der Oberfläche. Diese folgt im Allgemeinen der Topografie der Probe.

Piezoelemente:

Die Bewegung des Rastertunnelmikroskops, sowohl bei der Grobannäherung an das Substrat als auch beim Rastern der Tunnelspitze über die Probe, muss mit hoher Genauigkeit erfolgen. Es müssen in alle drei Raumrichtungen Verschiebungen im Pikometerbereich möglich

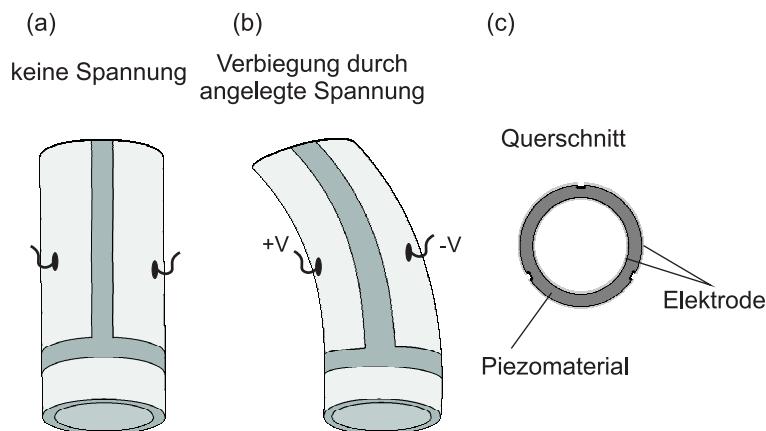


Abbildung 25: Skizze der Piezoelemente die mit Elektroden beschichtet sind. Die Elektroden sind in 90° Schritten geschlitzt. Durch Anlegen einer Spannung kann das Piezoelement verbogen werden.

sein. Dies erreicht man mit Hilfe von Piezoelementen. Diese bestehen aus nichtmetallischen Verbindungen, in denen unter Einwirkung von mechanischem Druck eine elektrische Polarisation entsteht (Piezo-Effekt). Als inversen Piezo-Effekt bezeichnet man die Verformung des Kristalles durch Anlegen einer Spannung. Kristalle die mindestens eine polare Achse aufweisen, d.h. keine Inversionssymmetrie entlang dieser Achse, können piezoelektrisch sein. Durch mechanische Deformation verschieben sich die verschiedenen geladenen Ionen im Kristall unterschiedlich stark, was zu einer elektrischen Polarisation führt. Besitzt der Kristall auch ohne Anlegen von äußerem Druck eine elektrische Polarisation, so spricht man von Ferroelektrizität. In der Rastertunnelmikroskopie werden Keramiken, die in polykristalliner Form vorliegen, verwendet (z.B. Blei-Zirkonat-Titanat (PZT)). Die Materialien bestehen aus Domänen, die eine bestimmte Polarisation aufweisen, jedoch sind die Polarisationsrichtungen der verschiedenen Domänen ungeordnet. Es liegt zunächst keine Nettopolarisation vor. Bevor die Piezos benutzt werden können, werden durch Anlegen einer elektrischen Spannung alle Domänen in eine Richtung polarisiert. Das Material wird makroskopisch gesehen stark anisotrop und weist einen grossen Piezo-Effekt auf. Die Verwendung von Keramiken hat gegenüber einkristallinen Verbindungen den Vorteil, dass die Polarisation in beliebige Richtungen erfolgen kann.

Rasterbewegung:

Damit die Piezoelemente in der Rastertunnelmikroskopie verwendet werden können, wird das Material mit einer leitenden Elektrode beschichtet. Anschliessend wird die Elektrode in 90° Schritten geschlitzt, so dass keine elektrische Verbindung zwischen den einzelnen Segmenten besteht. Es können nun alle Segmente einzeln mit elektrischen Spannungen angesteuert werden, was zu einer Verbiegung des Piezos führt, wie es in Abb. 25 skizziert ist. Durch Verbiegung aller Piezos in eine Richtung bewegt sich der Probenhalter, der auf den Piezos liegt, ebenfalls in dieselbe Richtung. Durch geschickte Wahl der angelegten Spannungen kann ein quadratisches Feld der Probe abgerastert werden (siehe Abb. 25 (b)).

Grobannäherung:

Die Grobannäherung wird durch das "slip-stick" Verfahren gewährleistet (Abb. 26). Durch Anlegen von Sägezahn-Pulsen werden die Piezos erst langsam verbogen ($t_0 \rightarrow t_1$) und anschliessend schnell in die Ausgangssituation zurückbewegt (Flanke des Sägezahns ($t_1 \rightarrow t_2$)). Der Probenhalter bewegt sich während des Spannungsanstieges mit den Piezos mit, kann jedoch

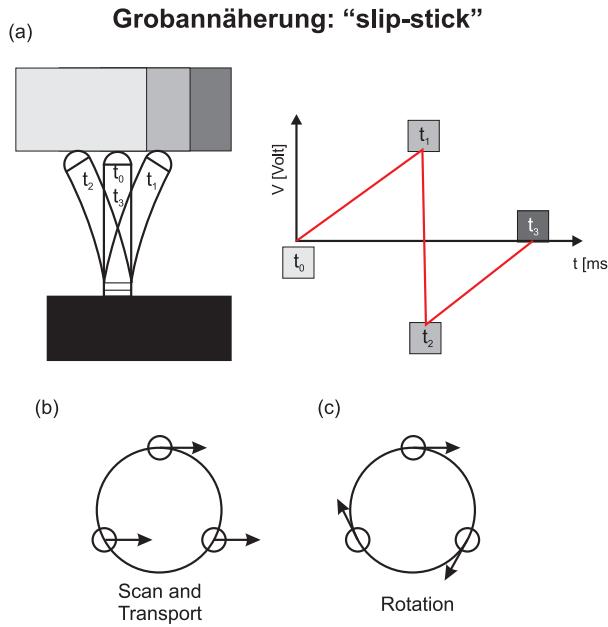


Abbildung 26: Funktionsweise der Grobannäherung und Rasterung des Rastertunnelmikroskops (Erklärung siehe Text).

aufgrund seiner Trägheit der Bewegung der Piezos in der steil abfallenden Flanke von t_1 nach t_2 nicht folgen. Die halbkugelförmigen Köpfe der Piezobeinchen überwinden die Haftreibung und rutschen über den Probenhalter, bis sie eine neue Haftposition zum Zeitpunkt t_2 erreichen (“slip-stick”). Der Probenhalter hat sich somit um eine geringe Strecke gegenüber den Piezos verschoben. Wie in Abb. 23 zu sehen ist, besteht der Probenhalter aus drei Rampen, die zentrisch um die Probe angeordnet sind. Durch geeignete Wahl der Piezospanssungen bewegen sich alle drei Piezobeinchen tangential zum Probenhalter (Abb. 26(c)). ”Slip-stick” führt dann zur Rotation des Probenhalters. Die Bewegung der Beine relativ zu den Rampen führt zur Annäherung der Probe an die Spitze. Während des Annäherns wird der Tunnelstrom gemessen. Die Probe wird solange angenähert, bis ein Tunnelstrom fließt.

5 Versuchsdurchführung

5.1 Hochorientiertes pyrolytisches Graphit (HOPG)

Die atomare Auflösung von HOPG hat in der Anfangszeit der Rastertunnelmikroskopie zu vielen Spekulationen und Modellen geführt. In den wissenschaftlichen Artikeln [14], [15] kann einiges zur Interpretation der Bilder herausgefunden werden. Diese sind auf der Website des Versuchs verlinkt, bzw. werden vom Versuchsbetreuer ausgegeben.

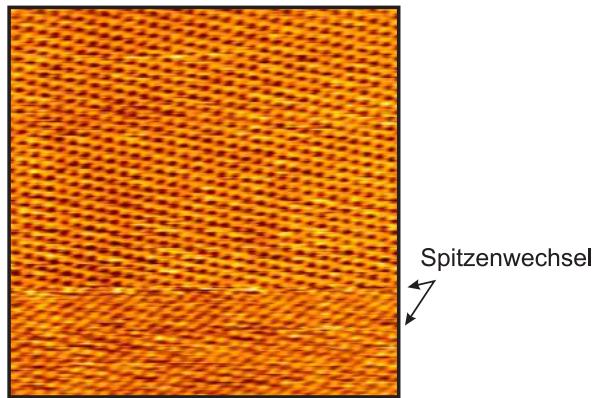


Abbildung 27: Atomare Auflösung des HOPG Substrates. $7,2 \text{ nm} \times 7,2 \text{ nm}$, $I=24 \text{ nA}$, $U=+0.6 \text{ V}$. Im unteren Teil des Bildes hat es eine Veränderung des Spitzens geweckt. Dies führt dazu, dass die Atome des HOPGs anders abgebildet werden.

Folgende Arbeitsschritte sind im Experiment durchzuführen:

1. Großes Bild von HOPG ($1000 - 2000 \text{ Å}$), Auffinden einer **Stufenkante** durch manuelle Verschiebung des Scan-Piezos (siehe 7.1). Verwenden Sie hierzu Tunnelströme von $1,0 \text{ nA}$ bis $5,0 \text{ nA}$ und Spannungen von $\pm 0,5 \text{ V}$ bis $\pm 1,5 \text{ V}$. Es ist darauf zu achten, dass der Regelkreis richtig eingestellt ist (siehe Abb. 36). Die Stufenkante sollte scharf abgebildet werden, was auf eine gute Spitzens schließen lässt. Bei einer Doppelspitze hat nicht immer das gleiche Atom der Spitzens den geringsten Abstand zum Substrat. Es kommt zur Überzeichnung und die gleiche Stufenkante wird doppelt abgebildet.
 - Handelt es sich um eine Doppel- oder Mehrfachspitze, kann durch leichtes Klopfen am Gehäuse, durch das kurze Anlegen einer hohen Spannung (max. 10V), das Schwingen des Regelkreises oder durch vorsichtiges Eintauchen in das Substrat die Spitzens verändert werden. (Es bedeutet allerdings nicht, dass die Spitzens zwingend besser wird.) Speichern der Bilder nicht vergessen.
2. Die Oberfläche des HOPG soll mit **atomarer Auflösung** abgebildet werden, wie dies in Abb. 27 zu sehen ist. Dazu muss die Bildgröße auf ca. $10 - 50 \text{ Å}$ gestellt werden. Durch die Variation von Spannung und Strom kann bei einer guten Spitzens relativ schnell atomare Auflösung erreicht werden.
 - Nehmen Sie jeweils **2 Bilder** unterschiedlicher **Größe** mit je zwei verschiedenen **Scangeschwindigkeiten** auf und speichern Sie diese.

Auswertung:

- zu 1. Die großen Übersichtsbilder mit den Stufenkanten sollen beschrieben werden. Außerdem soll die Höhe der Stufenkante ermittelt (siehe Abb. 40), und mit dem Literaturwert verglichen werden. Sonstige auffällige Bereiche kurz beschreiben.

zu 2. Zunächst diskutieren Sie, was anhand der atomaren Auflösung von Graphit zu sehen ist. Dazu lesen Sie das Paper [14] und diskutieren Sie Ihre Ergebnisse.

Ebenfalls soll mithilfe der atomaren Auflösung von Graphit die Korrugation bestimmt werden. Dazu legen sie ein Profil über möglichst viele Atome entlang der drei dichtgepackten Richtungen, und bestimmen den Mittelwert mit Fehler der Korrugation. Jeweils an zwei verschiedenen Bildgrößen. Vergleichen sie diese mit der Literatur [15], und diskutieren sie ihre Ergebnisse.

Zur Interpretation der atomaren Auflösung kann ebenfalls das Paper [7] herangezogen werden.

5.2 Ladungsdichtewellen auf TaS_2

Nun soll das Phänomen der Ladungsdichtewellen auf TaS_2 untersucht werden.

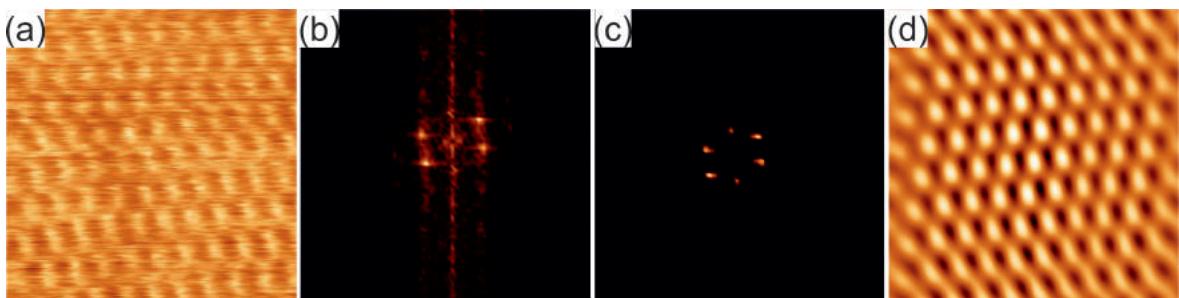


Abbildung 28: (a) Ladungsdichtewellen auf TaS_2 , Bildgröße $10,4 \text{ nm} \times 10,4 \text{ nm}$, ungefiltertes STM Bild bei $U_{Bias} = 10 \text{ mV}$ und $I = 2 \text{ nA}$. (b) Fourier-Transformation von (a). (c) Die Wellenlänge der Punkte mit der größten Helligkeit wird ausgeschnitten. (d) Anwenden des Filters auf (a), die Ladungsdichtewellen sind deutlich zu sehen.

1. Nehmen Sie ein Übersichtsbild (Bildgröße etwa 100 nm) auf, und suchen Sie mittels Variation der Offset-Spannung an den Scan-Piezos eine flache Stelle.
2. Nun sollen die Ladungsdichtewellen abgebildet werden. Dazu wählen Sie eine Bildgröße im Bereich 20 nm - 5 nm. Dann fahren Sie die Spannung langsam runter, um die geeigneten Zustände zu betrachten. Gute Werte sind $U = 10 \text{ mV}$ und $I = 3 \text{ nA}$. Nehmen Sie mindestens drei verschiedene Bildgrößen der Ladungsdichtewellen auf.
3. Zuletzt soll ein Bild aufgenommen werden, in dem Ladungsdichtewellen und die atomare Auflösung zu sehen sind. Einstellung von Strom und Spannung bleiben wie oben, Bildgröße ca. 15 nm - 20 nm.
Ist die Spitzene nicht so gut, kann die gleiche Stelle immer weiter gescannt werden. Die Spitzene verändert sich währenddessen und es besteht die Möglichkeit eine gute Spitzene zu bekommen. Dies kann in *Scan → Autorepeat* eingestellt werden. Möchte man zusätzlich alle Bilder direkt speichern, so wählt man *Autofilesave* an.

Auswertung:

zu 1. **Beschreiben** Sie das Bild

- zu 2. Hier soll die **Periodizität der Ladungsdichtewellen** bestimmt werden. Die Bilder sollten zunächst mit einem Fourier-Filter bearbeitet werden (siehe Abb. 28). Anhand **einer** Orientierungsrichtung des Gitters (warum nur eine? Welche Richtung ist sinnvoll?) soll die Periodizität der Ladungsdichtewellen bestimmt werden. Dazu legen Sie ein Profil über möglichst viele Maxima und bestimmen die Wellenlänge. Dies soll bei drei verschiedenen Bildgrößen durchgeführt werden. Mitteln Sie ihr Ergebnis und vergleichen Sie Ihr Ergebnis mit der Literatur.
- zu 3. Filtern Sie das Bild wie in (2.), mit dem Unterschied das nun jeweils die atomare Auflösung und die Ladungsdichtewellen zu sehen sein sollen. Wie macht sich die atomare Auflösung in dem Fourier-Transformierten Bild bemerkbar? Bestimmen Sie nun die **Wellenlänge der Ladungsdichtewellen in Einheiten der Gitterkonstante** von TaS_2 . Bestimmen Sie ebenso den **Winkel** der Ladungsdichtewellen relativ zum atomaren Gitter.
Führen Sie für Ihre Ergebnisse eine Fehlerdiskussion durch und vergleichen Sie diese mit der Literatur.

5.3 Gold

In diesem Versuchsteil ist es möglich zwischen zwei verschiedenen Proben zu wählen. Einmal kann das Goldblech untersucht werden, oder Gold auf Glimmer. Die Aufträge sind aber beide gleich.

1. Aufnahme von großen Bildern der Goldoberfläche. Verwenden Sie hierzu Tunnelströme von 0.5 bis 5 nA und Spannungen von 0.5 bis 1.5 V. Gute Bilder speichern.
2. Aufnahme von $I(z)$ - Spektren. Dazu wird der Spektroskopie Modus geöffnet (siehe 7.1.4). Die Bias- Spannung sollte auf den gleichen Wert der Spannung eingestellt werden, mit der das Spektrum aufgenommen wird. Nun sollen **5 gute Spektren** aufgenommen werden. Unter **Load Vert Parameter müssen** erst einmal die Grundeinstellungen geladen werden.

Überlegen Sie sich, was gute Ergebnisse sind. Dazu gibt es einige Parameter, die eingestellt werden können:

- Spectlength - Die Länge der einzelnen Spektren
- SpecAvrgCount- Die Anzahl der Spektren über die gemittelt wird
- SpecAvrgdelay - Die Zeit zwischen den einzelnen Spektren über die gemittelt wird

Überlegen Sie sich welche Einstellungen sinnvoll sind und **probieren Sie es aus** (Begründung?).

Außerdem ist es wichtig auf den **Z-Drift zu achten**. Durch thermischen Drift ändert sich die Höhe der Probe, was in dem $I(z)$ Spektrum gut zu erkennen ist.

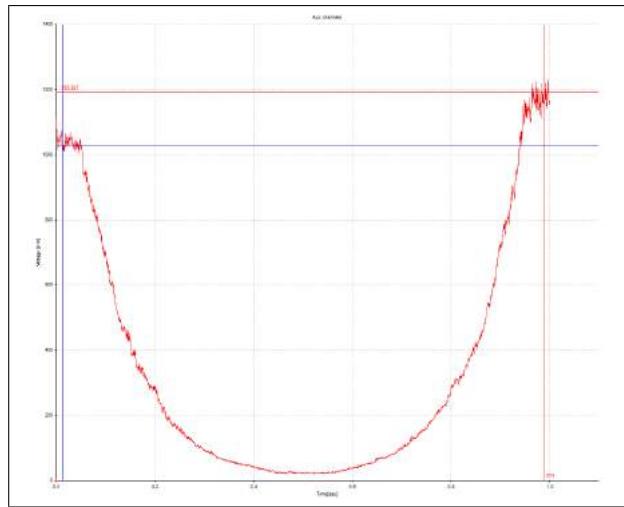


Abbildung 29: I(z)-Spektrum, durch thermischen Drift sind die beiden Enden des Spektrums nicht auf der gleichen Höhe.

Hierbei kann durch die Einstellung **Z-Drift** ein Ausgleich angegeben werden, sodass das Spektrum wieder auf der richtigen Höhe ist.

Gute Spektren wurden bei $U_{Bias} = 0,5$ V, $Z = -3$ Å, Spectlength=1 s, SpecAvrgCount=10, SpecAvrgdelay=0,3 s aufgenommen.

3. Als letztes in diesem Versuchsteil soll die **Spitze in das Substrat eingetaucht werden** und danach **noch einmal 5 gute Spektren aufgenommen werden**. Dazu stellen Sie in der V, Z Tabelle (Abbildung 38,(1)) die Änderung in Z-Richtung nicht negativ sondern positiv ein. Die Spitze wird dann in Richtung Probe gefahren. Beginnen Sie mit kleinen Änderungen, damit die Spitze nicht zu tief in die Probe eingetaucht wird. Was ändert sich im Spektrum wenn die Spitze in der Probe steckt? Speichern Sie das Spektrum, an dem es gut zu erkennen ist.
Danach gehen Sie wie in Punkt 2. vor und nehmen 5 Spektren auf.

Auswertung

- zu 1. Im Versuchsprotokoll sollen die Versetzungen anhand einer Abbildung gezeigt werden und die Ursache soll kurz beschrieben werden (siehe Abb. 20 (a)). Die aufgenommenen Bilder sollen interpretiert werden sowie Korngrenzen und Schraubenversetzungen identifiziert werden (Gold auf Glimmer).
- zu 2,3. Bestimmen Sie jeweils die Austrittsarbeit mit Fehler sowie den Mittelwert. Achten Sie besonders auf die richtigen Einheiten. Vergleichen Sie Ihr Ergebnis mit dem Literaturwert und führen Sie eine Fehlerdiskussion durch. Bei der zweiten Messung mit der Goldspitze bestimmen Sie ebenfalls die Austrittsarbeit und vergleichen diese mit dem vorherigen Wert.
Erklären Sie außerdem, woran und warum am Spektrum zu erkennen ist, dass die Spitze in der Probe steckt.

6 Protokoll

Die Auswertung der STM Daten erfolgt mit dem Program WSxM, das Sie sich aus dem Internet runterladen können [9] und das Ihnen vom Betreuer erklärt wird. Die wichtigsten Funktionen sind in Abb. 40 gekennzeichnet. Jede Praktikumsgruppe soll mindestens einen USB Stick mitbringen.

Das Protokoll soll klar und verständlich, nachvollziehbar sowie in einer wissenschaftlichen Ausdruckweise abgefasst sein.

- Abstract (Englisch, ca. 10 Zeilen): Hier sollen die wichtigsten Ergebnisse des Versuches beschrieben sein.
- Einleitung (Funktionsweise des Rastertunnelmikroskops, Art der Substrate, Inhalte, die im Antestat besprochen wurden.)
- Versuchsaufbau und Durchführung (kurz)
- Versuchsergebnisse und Diskussion
- Zusammenfassung (kurz)

Im Versuchsprotokoll sollen alle wichtigen STM Abbildungen, die für die Auswertung benutzt wurden, gezeigt und beschrieben werden. Zu jedem STM Bild sollen die wichtigsten Parameter (Tunnelstrom, Spannung, Bildgröße) angegeben sein. Die Auswertungsmethoden sollen nachvollziehbar dokumentiert werden. Zu allen Auswertungen muss eine Fehlerdiskussion durchgeführt werden. Abbildungen bzw. Passagen/Formeln/Ideen, die Sie aus anderen Quellen entnehmen, müssen korrekt zitiert werden.

7 Anhang: STM Elektronik

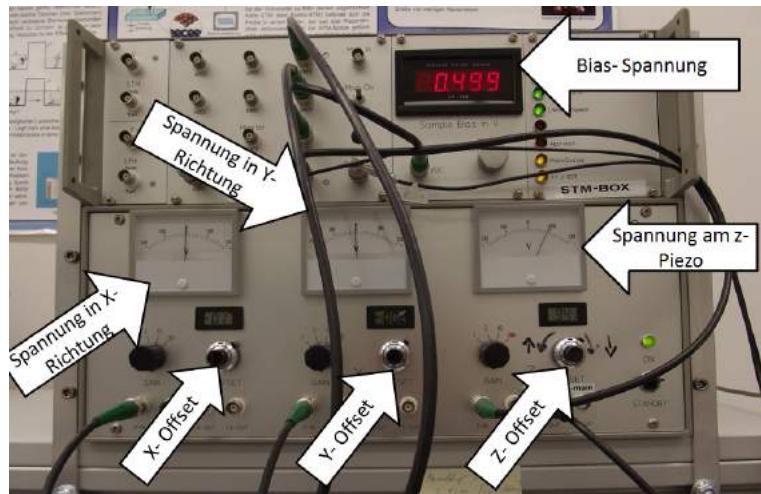


Abbildung 30: Frontansicht der Elektronik.

7.1 Beschreibung der einzelnen Bedienelemente der STM Elektronik

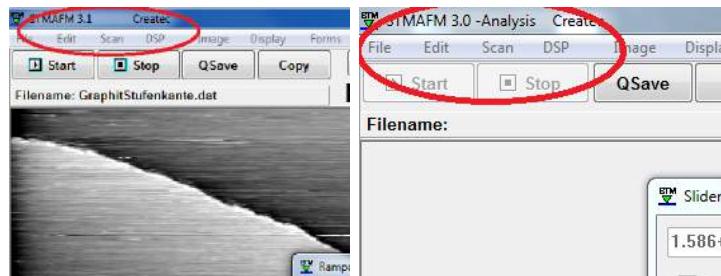
Die STM-Elektronik, mit der das STM angesteuert wird, ist in Abb. 30 abgebildet. Die Bias-Spannung ist die Spannung, die an der Probe anliegt. An der Spannung am z-Piezo ist erkennbar, wie sich die Spitze bewegt. 100 V bedeutet, die Spitze ist vollständig ausgefahren, und -100 V sie ist maximal von der Probe zurückgefahren. Die Spannung in x- und y- Richtung zeigt die Bewegung der Spitze. X läuft beim Scan hin und her, es zeigt die Bewegung die die Spitze beim Scannen über die Probe vollführt. Y bewegt sich nur langsam in eine Richtung, da die Spitze nach jeder Bewegung in x-Richtung eine Einheit weiter in y-Richtung fährt. Die Nullstellung der Anzeigen ist auf 5, diese Einstellung kann an dem jeweiligen Offset eingestellt werden. Damit besteht auch die Möglichkeit, von Hand etwas nachzustellen und somit einen anderen Bereich auf der Probe abzufahren.

Die Steuerung des STMs läuft über das Programm *PSTMAMF*, das Icon befindet sich auf dem Desktop. In der nun folgenden Beschreibung wird einfach der natürliche Verlauf einer Messung beschrieben, indem die einzelnen Parameter erklärt werden. Zum einfacheren Verständnis wird die Messung in mehrere Bereiche aufgeteilt.

1. Elektronik und Programmstart
2. Annäherungsphase
3. Scan
4. Aufnahme von Spektren

7.1.1 Die Annäherungsphase

Das Programm kann in 2 verschiedenen Versionen starten. Das ist zum einen der Analysemodus, indem die aufgenommenen Bilder analysiert werden können. Das Programm startet automatisch in diesem Modus, wenn es nicht mit der Hardware verbunden ist oder es Verbindungsprobleme gibt. Um das zu vermeiden, sollte das USB-Verbindungskabel erst in den PC eingesteckt werden, wenn dieser hochgefahren und die Elektronik vollständig eingeschaltet ist. Der Status wird in der oberen Leiste angezeigt.



(a) Mess-Zustand.

(b) Analysis-Zustand.

Abbildung 31: Software-Status.

Weiterhin sollte die Anzeige der Spannung am z-Piezo im Auge behalten werden. Diese befindet sich in dem Intervall $[-100 \text{ V}, 100 \text{ V}]$. Wenn die Spitze maximal ausgefahren ist steht die Anzeige auf 100 V. Wenn sie eingezogen ist auf -100 V .

Der erste Schritt zu einer neuen Messung besteht darin, ein altes Bild zu laden um die entsprechenden Parameter nicht alle von Hand einzustellen zu müssen. Dies geschieht durch *File -> Open *.DAT* und im entsprechenden Verzeichnis (Desktop -> Praktikum -> Standardeinstellungen) wird eine Datei ausgewählt. Die Parameter werden dann überschrieben und wir befinden uns in der richtigen Einstellung.

Es öffnet sich nun das *Slider*- Fenster.

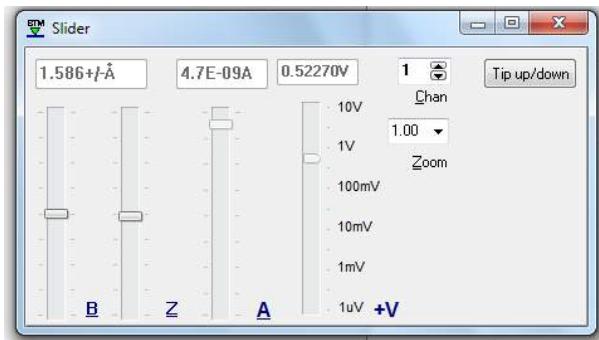


Abbildung 32: Slider.

Hier interessieren die beiden Slider auf der rechten Seite, mithilfe derer der Soll-Strom und die Bias-Spannung geregelt wird. Zur Annäherung sollte die Spannung auf $U = 1 \text{ V}$, und der Strom auf $I = 2 \text{ nA}$ gesetzt werden.

Durch das Betätigen des Buttons *Tip up/down* kann die Spitze eingezogen und ausgefahren werden. Der Slider unter z wird benutzt, um den Kontrast des aufgenommenen Bildes anzupassen. Dazu bewegt man ihn, und klickt danach auf den DA- Button. (siehe Abb. 34, blauer Kreis)

Unten rechts befindet sich die Anzeige $+ \text{V}$, durch klicken darauf kann sie auf $- \text{V}$ umgestellt werden. Dies bezeichnet die Richtung in der die Spannung angelegt wird. Die Elektronen tunneln also aus der Probe in die Spitze oder umgekehrt.

7.1.2 Annähern

Wenn der Probenhalter auf den Piezo-Beinchen aufgesetzt worden ist, wird mithilfe der Software ein Annäherungsvorgang durchgeführt, um die Spitze in den Tunnelkontakt zu bringen. Nun kann das Annähern gestartet werden. Das Tool hierfür ist der *Ramp-Controller*.

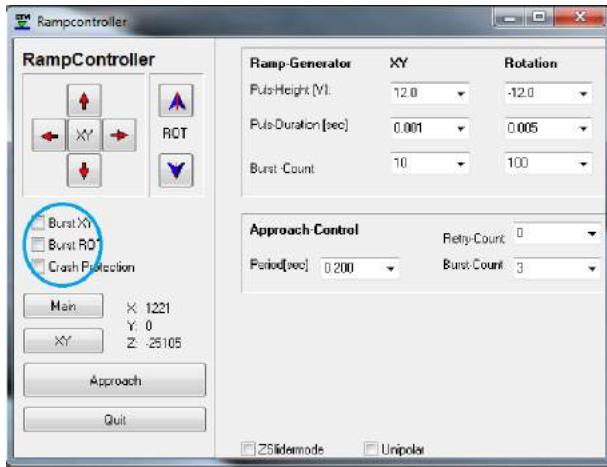


Abbildung 33: Ramp Controller.

Dieser befindet sich unter *Forms -> Ramp Controller*. Mithilfe dieses Controllers kann der Probenhalter bewegt werden. Einmal in x-y-Richtung, hier kann der Probenhalter lateral über der Spitze bewegt werden. Zur Annäherung in z-Richtung an die Spitze dienen die Pfeil-Buttons bei denen ROT steht. Der Probenhalter rotiert dabei auf den Piezo- Beinchen und läuft nach unten. Durch das Klicken auf einen der Pfeile bewegt sich der Probenhalter um einen Klick weiter, d.h. es wird ein Sägezahnimpuls an die entsprechenden Piezos angelegt. Durch das Anwählen der Kästchen *Burst XY* oder *Burst Rot* werden mehrere Impulse nacheinander angelegt. Die Anzahl kann unter *Burst - Count* eingestellt werden.

Nun die Annäherung. Gehen sie zunächst einen Schritt durch drücken einer der Tasten ROT (Abb. 33). Dann wird auf den Button *Approach* geklickt, und der Annäherungsvorgang startet. Nun sollte der Vorgang laufen, dies ist einmal an einem leisen Klicken im STM zu merken, sowie an der Spannungsanzeige am z- Piezo. Diese springt hin und her, da die Spitze aus- und eingefahren wird. Der Probenhalter läuft nun die Rampen hinunter, je nachdem wie viele Burst-Counts eingestellt worden sind werden diese in einem Schritt abgelaufen. Es sollten nicht mehr als 3 eingestellt werden. Hier wird die Spitze nun immer wieder ausgefahren und getestet, ob der Tunnelkontakt vorhanden ist. Ist das der Fall, so bricht der Vorgang ab und der Strom wird auf 0 gesetzt. Durch das manuelle Hochstellen des Stromes ist an der Anzeige des z-Piezos zu erkennen, ob der Tunnelkontakt auch wirklich hergestellt ist. Die Nadel sollte sich zwischen 0 V und 100 V befinden, damit sie bei eventueller hoher Oberflächenrauigkeit noch genug Spielraum hat um nach oben weggezogen zu werden, und nicht mit der Probe kollidiert.

Falls es zu Schwierigkeiten beim Annähern kommt, könnte das folgende Ursachen haben:

1. Sie haben versehentlich ein Häkchen im Ramp-Controller (Abb. 33, blauer Kreis) gesetzt.
2. Sie haben vergessen vor Approach einen Schritt zu gehen. Dann müssen Sie das Fenster *Slider* öffnen. Dies geschieht unter *Forms → Slider*. Dort stellen Sie den Strom von 0 wieder auf die alte Position, einen Wert im nA-Bereich.

Um den Ramp-Controller zu schließen, sollte die Spitze eingezogen sein. Ansonsten könnte sie beschädigt werden. Nach dem Schließen kann sie wieder ausgefahren werden. Damit hätten wir die erste Phase abgeschlossen.

7.1.3 Der Scavorgang

Nun können wir die Probe mithilfe des STMs scannen. Dazu wird der Button *Start* angeklickt.



Abbildung 34: Scan Button.

Nun scannt die Spitze einen bestimmten Bereich der Probe. Mit dem Button *Stop* kann die Messung angehalten werden. Soll die Messung gespeichert werden, wird *File -> Save*.DAT* ausgewählt und im gewünschten Ordner gespeichert. Die nun folgenden Messungen können durch den Button *Quicksave* direkt in den gewählten Ordner gespeichert werden. Um den Kontrast der Messung automatisch anzupassen, kann der Button *LA* (Linear Autoscale) angewählt werden.

Wie werden aber jetzt die einzelnen Scan-Parameter wie Bildgröße, Geschwindigkeit etc. geändert? Dazu dient das Fenster *Forms -> Parameter*.

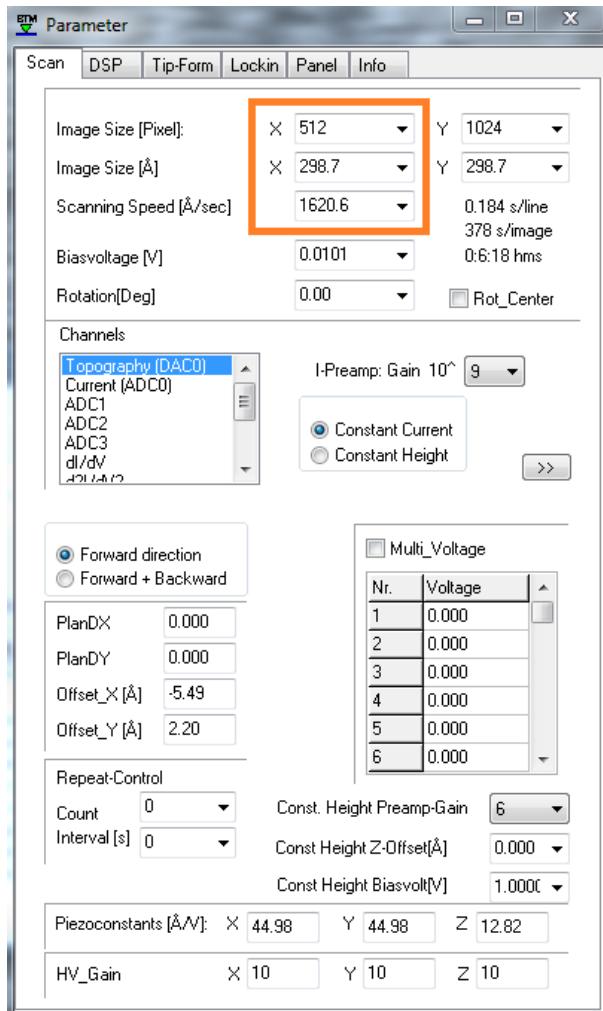


Abbildung 35: Parameter.

Unter dem Reiter *Scan* können alle wichtigen Einstellungen vorgenommen werden. Standard-

mäßig steht die Auflösung auf 512 Pixel. Sollte eine bessere Auflösung gewünscht sein, kann diese auch hochgestellt werden. *Image Size* ändert die Bildgröße und *Scanning Speed* die Scangeschwindigkeit. Die Biasvoltage wird schon mit dem vorherigen Regler gesteuert, hier besteht die Möglichkeit sie genauer festzulegen indem der gewünschte Wert einfach eingegeben wird. Die Piezokonstanten befinden sich unten im Fenster. Diese geben an, um wie viel Angström sich das Piezo verbiegt, wenn ein Volt angelegt wird. Davon ausgehend werden auch die Größen Geschwindigkeit und Bildgröße berechnet. Die richtigen Konstanten beim Scan sind (33,23; 33,23; 12,82). Nun können verschiedene Bilder in unterschiedlichen Größen, Scangeschwindigkeiten, Tunnelstrom und Biasspannung aufgenommen werden.

Im Kopf des Fensters befinden sich noch zusätzliche Reiter. Wichtig ist der Reiter *DSP*. Folgendes Fenster öffnet sich nun.

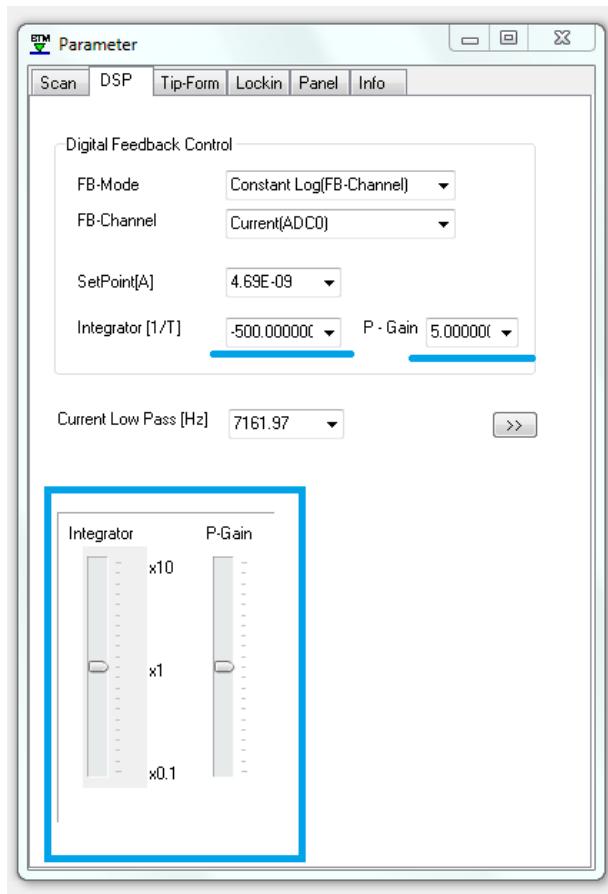


Abbildung 36: Regelkreis

Hier kann der Regelkreis eingestellt werden. Durch die beiden Sliders *Integrator* und *P-Gain* können die Konstanten (blau unterstrichen) aus dem Regelkreis angepasst werden. Dazu werden die Sliders hoch und runter gefahren. Die manuell eingegebenen Konstanten können um den Faktor 0, 1 - 100 verändert werden. Wenn dieser Bereich nicht ausreicht, können die Konstanten manuell verändert werden. Dies geht jedoch nicht während des Scavorgangs. Die Auswirkungen der Einstellung des Regelkreises sind gut in dem Fenster *LinescanForm1* zu erkennen.

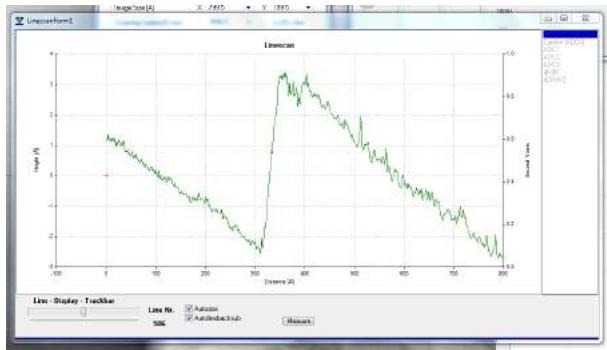


Abbildung 37: Linescan.

Der Linescan kann unter *Scan-> Display Current Scan Profil* aufgerufen werden. Oben rechts sollte *Topography* angewählt sein, und unten *Autolinebacksub*. Dann wird jeweils von einer Scanlinie das aufgenommene Signal angezeigt. Wenn der Regelkreis zu stark eingestellt ist, kann hier das Schwingen sehr gut erkannt werden.

7.1.4 Aufnahme von Spektren

Der letzte Bereich ist die Aufnahme eines Spektrums. Hierzu wird *Vertical Manipulation* verwendet, das wiederum unter *Forms* zu finden ist.

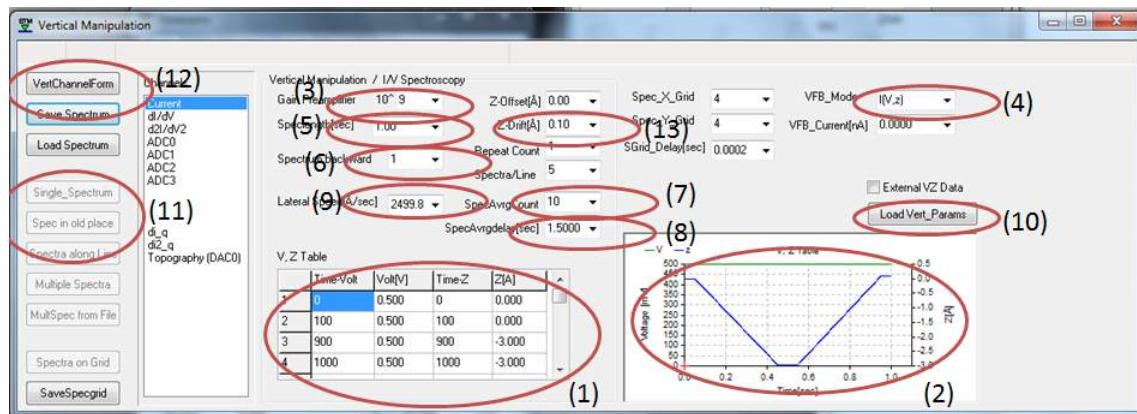


Abbildung 38: Vertical Manipulation zur Aufnahme von Spektren

Die wichtigsten Einstellungen werden in (1) getroffen. Das Spektrum gliedert sich in 3 Bereiche. Zuerst einmal ein kurzer Bereich in dem der Abstand der Spitze zur Probe gleich bleibt, dann ein linearer Anstieg und zuletzt wieder ein konstanter Bereich. Dies ist auch in dem Diagramm (2) zu erkennen. In dem abgebildeten Beispiel wird die Spitze um 3 \AA hochgezogen. In der ersten und dritten Spalte wird die Anzahl der Datenpunkte festgelegt. Die meisten Datenpunkte werden im Anstieg aufgenommen, da hier die relevanten Daten sind. Ein Richtwert sind 1000 Datenpunkte insgesamt. Die Spannung wird konstant gehalten. Zuletzt muss noch die Höhe eingestellt werden, die die Spitze hochgefahrt werden soll. Hierbei bedeutet negativ, dass die Spitze hochgezogen wird. Die Grafik (2) zeigt die Einstellungen die in der Tabelle getroffen worden sind. Durch das Einstellen von *Spectrum backward* (6) wird das Spektrum während des Zurückziehens der Spitze ebenfalls aufgenommen. Dies ist in der Grafik auch zu erkennen.

Es ist darauf zu achten, dass die Verstärkung (3) auf 10^9 steht und dass (4) auf $I(V,z)$ steht. (5) gibt die Länge eines Spektrums an, (6) ob auch das Spektrum zurück aufgenommen werden soll, bei (7) kann angegeben werden über wie viele Spektren gemittelt werden soll und

(8) bezeichnet die Zeit zwischen den einzelnen Spektren. Unter (9) sollte der größtmögliche Wert gewählt werden. Dieser gibt die Geschwindigkeit der Spitze an, die zu dem Ort des Spektrums fährt. Unter (10) können die einzelnen Parameter dann gespeichert bzw. wieder geladen werden. Unter (11) kann nun ein Spektrum aufgenommen werden. Dazu wird der Button *Single Spektrum* angeklickt, sowie in einem aufgenommenem Bild auf den gewünschten Punkt geklickt. Nun wird das Spektrum aufgenommen. Zusätzlich besteht über den anderen Button die Möglichkeit, noch einmal an der gleichen Stelle ein Spektrum aufzunehmen. Gute Werte sind

- (5): 1s
- (7): 10
- (8): 0,3 s - 1 s

Über (12) kann das nun sichtbar gemacht werden. Es öffnet sich nun ein neues Fenster, das das Spektrum anzeigt.

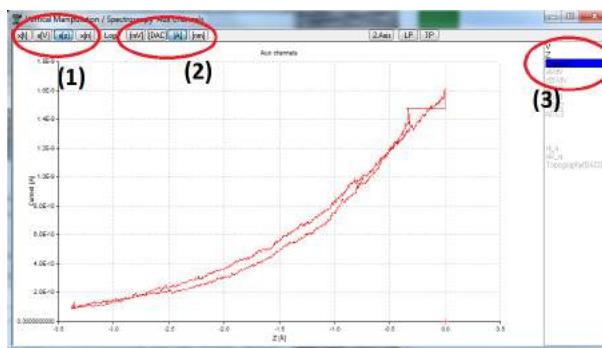


Abbildung 39: Das aufgenommene Spektrum

Den Messwert stellt man unter (3) auf den Strom (*Current I*). Unter (1) besteht die Möglichkeit den Strom in Abhängigkeit von der Zeit zu messen oder direkt von dem Abstand z . Unter (3) kann zwischen Angström und Nanometer gewählt werden. Die Daten des aufgenommenen Spektrum können unter Rechtsklick -> *CopyClipboardData* in eine Text-Datei gespeichert und darüber dann ausgewertet werden. Eine wichtige Sache ist noch die Drift der Probe. Da es sich um sehr kleine Abstände handelt, kann dieser durch z.B. thermische Drift variieren. Das ist daran zu erkennen, dass die Spitze beim Zurückfahren nicht mehr so hoch kommt wie am Anfang (siehe Abb.29). Dem kann entgegengewirkt werden, und zwar durch das Feld *Z-Drift* (13). Hier kann das Spektrum etwas verschoben werden, in Abb. 38 Punkt (2) ist dieses auch zu erkennen. Die rechte Seite ist um 0,1 Å nach oben verschoben, um die Drift auszugleichen.

8 Anhang: Beschreibung WSxM

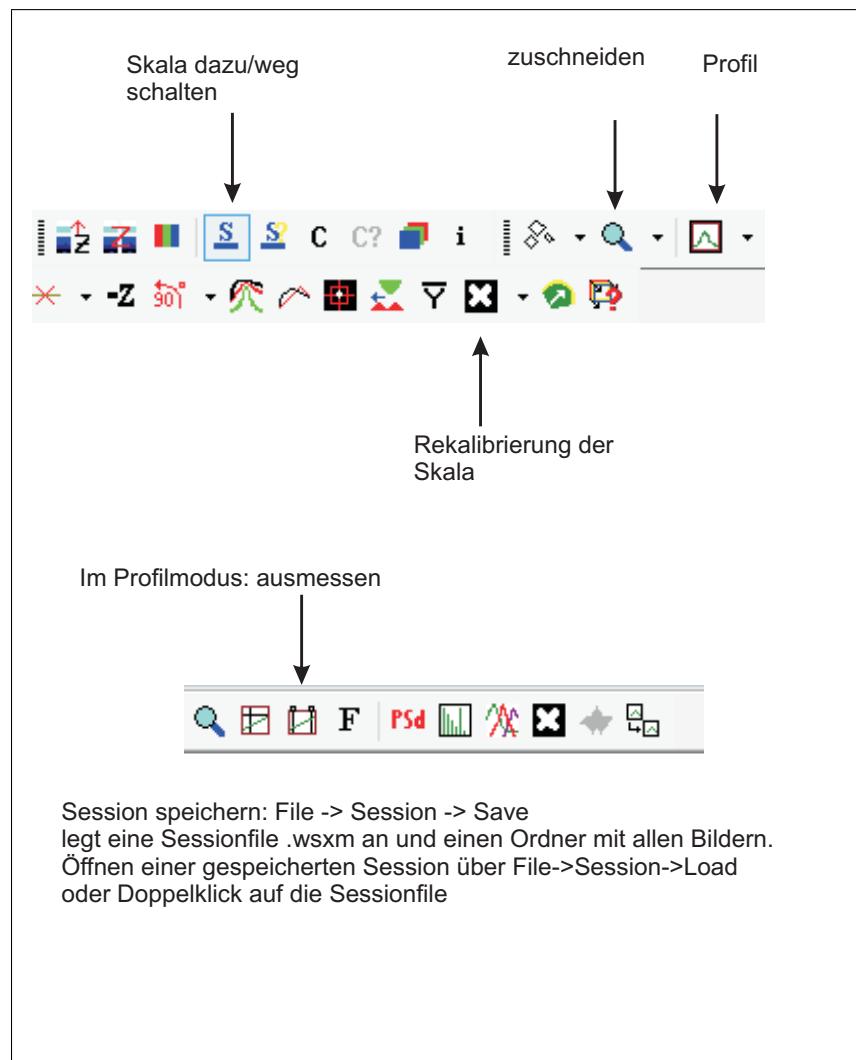


Abbildung 40: Wichtigsten Funktionen WSXM

Literatur

- [1] J. Barth, H. Brune, G. Ertl, R. Behm, *Phys. Rev. B*, **1990**, *42*(15), 9307-9318
- [2] G. Binning, H. Rohrer, C. Gerber, E. Weibel, *Phys. Rev. Lett.*, **1982**, *49*, 57-60
- [3] M. Crommie, C. Lutz, D. M. Eigler, *Science*, **1993**
- [4] Hansen, H.; Redinger, A.; Messlinger, S.; Stoian, G.; Rosandi, Y.; Urbassek, H. M. and Michely, T. Mechanisms of pattern in grazing- incidence ion bombardment of PT(111) *Phys. Rev. B*, **2006**, *73*, 235-414
- [5] Ibach, H. Physics of surfaces and interfaces, **2006**
- [6] Kittel, C. Einführung in die Festkörperphysik, **1999**
- [7] G. Binnig, H. Fuchs, Ch. Gerber, H. Rohrer, E. Stoll, Europhysics Letters, **1985**, *1*, 31-36
- [8] Michely, T. Krug, J.; Islands mounds and Atoms, **2004**
- [9] Nanotec, <http://www.nanotec.es/>
- [10] Sinitsyna, O.; V. Yaminsky, I. V.; Atomic resolution probe microscopy of the graphite surface *Russian Chemical Reviews*, **2006**, *75* (1), 23-30
- [11] Chen, C. Julian: Introduction to Scanning Tunneling Microscopy. Auflage 2. Oxford University Press, **1993**.
- [12] Hunkliger, Siegfried: Festkörperphysik, Auflage 3, Oldenburg Wissenschaftsverlag GmbH, **2011**
- [13] Wikipedia, Bloch- Funktion, Abrufdatum 14.07.2014, <http://de.wikipedia.org/wiki/Bloch-Funktion>
- [14] H. A. Mizes, Sang-il Park, W. A. Harrison, *Phys. Rev. B*, **1987**, *36*, 4491-4494
- [15] H. J. Mamin, E. Ganz, D. W. Abraham, R.E. Thomson, J. Clarke, *Phys. Rev. B*, **1986**, *34*, 9015-9018
- [16] <http://www.goodfellow.com/G/Iridium.html>
- [17] Sweers, Guido, 2012. *Gewöhnliche Differentialgleichungen*, Vorlesungsskript. Universität zu Köln.
- [18] J. A. Wilson, F. J. Di Salvo, S. Mahajan, *Advances in Physics*, **1975**, *24*, 117-201
- [19] University of Liverpool, <http://www.chemtube3d.com/solidstate/SS-MS2.htm>
- [20] R. E. Thomson: Scanning Tunneling Microscopy of Charge Density Wave Structure in $1T - TaS_2$, Phd Thesis, University of California, **1991**.
- [21] Joachim, Krug, 2011. *Theoretische Physik in zwei Semestern II*, Vorlesungsskript, Universität zu Köln.
- [22] S. Schumacher: Structure, Magnetism, and Binding of Novel Two- Dimensional Materials: Europium- Intercalated Graphene, Cluster Lattices, and Polar Oxide Bilayers, Phd Thesis, Universität zu Köln, **2014**.

9 Fragebogen

Fragebogen zum B-Praktikum

Rastertunnelmikroskopie

Bitte füllen Sie den Fragebogen am Ende des Versuchs aus und besprechen Sie ggf. die Kritik direkt nach dem Ausfüllen mit den Betreuern.

Die Bewertung erfolgt nach dem “Schulnoten-Prinzip” (1: sehr gut – 6: ungenügend)

Semester: Winter 20 / — Sommer 20 —

Frage 2: Wie beurteilen Sie die technische Ausstattung dieses Versuchs?

Frage 4: Fördert der Versuch Ihre experimentellen Fähigkeiten? 1 2 3 4 5 6

Frage 5:
Hat Ihnen der Versuch Spaß gemacht?

Frage 7: Wie hoch war der Zeitaufwand für die Vorbereitung? h

Studiengang: **Bachelor** **Lehramt**

Kommentare und Verbesserungsvorschläge

Gesamtnote für Ihren Betreuer/Betreuerin