

Rastertunnelmikroskopie - STM

Alex zur Bonsen
Moritz Feierabend
Jérôme Deumer

1 Physikalische Grundlagen

1.1 Quantenmechanischer Tunneleffekt anhand eines Kastenpotentials

Um die Funktionsweise des Rastertunnelmikroskop zu verstehen, ist es notwendig sich zunächst mit dem Tunneleffekt auseinander zu setzen.

Der Tunneleffekt ist ein quantenmechanisches Phänomen, das es Teilchen, deren Aufenthaltswahrscheinlichkeit mithilfe von Wellenfunktionen Ψ bestimmt werden kann, erlaubt, Potentialbarrieren mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit zu überwinden, obwohl die Energie des Teilchens E unterhalb der der Potentialbarriere V_0 liegt. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte entspricht dabei dem Betragsquadrat der Wellenfunktion $|\Psi(x)|^2$. Man kann sich die Potentialbarriere zur leichteren Erklärung als Kastenpotential vorstellen:

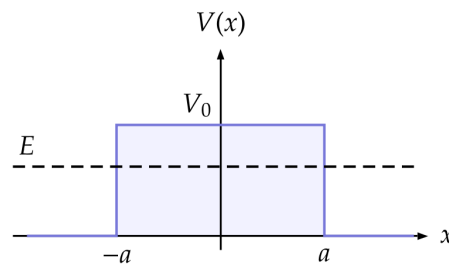


Abbildung 1: Kastenpotential

Die stationäre Schrödinger-Gleichung sieht im Fall einer eindimensionalen Potentialbarriere folgendermaßen aus:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \Psi(x) = E \cdot \Psi(x)$$

Die formalen Lösung der stationären Schrödinger-Gleichung lauten hierbei:

$$\Psi_j(x) = A_j \exp(ik_j x) + B_j \exp(-ik_j x)$$

mit $j \in 1, 2, 3$.

Der Index $j = 1$ steht hierbei für den Bereich vor dem Kastenpotential, $j = 2, 3$ entsprechend für die Bereiche innerhalb, bzw. hinter dem Kastenpotential (Betrachtung von links nach rechts auf der x-Achse). Der Koeffizient A_j ist die Amplitude des Wellenanteils, der sich von rechts nach links entlang der x-Achse bewegt, B_j hingegen die Amplitude des Wellenanteils, der sich von links nach rechts entlang der x-Achse bewegt. Wir betrachten ein Teilchen, welches sich von links nach rechts bewegt, dementsprechend gelten: $A_1 = 1$, $B_3 = 0$. Durch Aufstellen der stationären Schrödinger-Gleichung ergeben sich für die drei Wellenzahlen (k_1 , k_2 , k_3) folgende Werte:

$$k_1 = k_3 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad k_2 = \epsilon + \kappa \cdot i = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)} \cdot i}{\hbar}.$$

Da $k_2 \in \mathbb{C}$, handelt es sich bei $\Psi_2(x)$ um eine Wellenfunktion, die mit zunehmender Eindringtiefe exponentiell abfällt. Das bedeutet auch, dass die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte beim "Tunneln" der Barriere immer mehr abnimmt, sich das Teilchen aber immer noch mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit jenseits (rechts) von der Barriere finden kann:

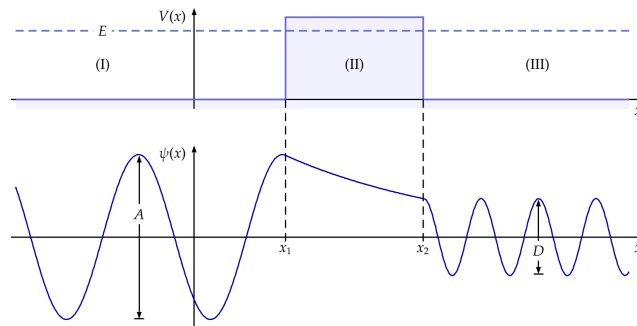


Abbildung 2: Wellenfunktion im Potentialkasten

Als Wahrscheinlichkeitsmaß für das "Tunneln" gilt der Transmissionskoeffizient T . Dieser gibt an mit welcher Wahrscheinlichkeit das Teilchen die Barriere passiert:

$$T = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2} = \frac{1}{\cosh(2\kappa a)^2 + \frac{(\kappa^2 - k_1^2)}{2k_1\kappa} \sinh(2\kappa a)^2}.$$

Der sogenannte Reflexionskoeffizient R hingegen gibt die Wahrscheinlichkeit an, mit der das Teilchen an der Barriere reflektiert wird. Dabei gilt immer: $T + R = 1$.

Bezogen auf das Rastertunnelmikroskop wäre das "tunnelnde" Teilchen ein Elektron, welches den Luftspalt (Potentialbarriere) zwischen der Spitze des Mikroskops und der Oberfläche des zu untersuchenden Materials überwindet und zu einem messbaren Strom führt. Die Breite des Luftspalts entspricht hierbei der Breite der Potentialbarriere, die Austrittsarbeit des Elektrons aus der Mikroskop-Spitze wiederum der Höhe der Potentialbarriere V_0 .

Der Tunnelstrom ist aufgrund des exponentiellen Abfalls der Wellenfunktion sehr Abstands-empfindlich. Voraussetzung für das Tunneln eines Elektrons ist eine Energiedifferenz in der Fermi-Energie zwischen Mikroskop-Spitze und der Graphit-Probe. Diese Energie-Differenz wird durch das Anlegen einer Spannung erzielt.

1.2 Fourier-Transformation - "Fourier-Trafo"

In der Quantenmechanik lässt sich die einem Zustand zugeordnete Wellenfunktion sowohl im Ortsraum $\Psi(x)$ als auch im Impulsraum $\Phi(p)$ darstellen. Beide Darstellungen sind über die Fourier-Trafo gekoppelt, sodass beispielsweise ein diskretes Spektrum in einem der beiden Räume einem kontinuierlichen Spektrum im anderen Raum zugeordnet ist:

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \Phi(p) \cdot \exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right) dp, \quad \Phi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \Psi(x) \cdot \exp\left(\frac{-ipx}{\hbar}\right) dx.$$

Mithilfe der Fouriertransformation können die mit dem Rastertunnelmikroskop aufgenommenen Strukturen sowohl im Ortsraum (Realraum) als auch im (Orts-)Frequenzraum dargestellt werden. Die periodischen Muster der Oberfläche (Ortsraum) werden auf diese Weise in ein Bild (Frequenzraum) transformiert, das aus wenigen scharfen und markanten Punkten besteht. Aus der Anordnung dieser Peaks lassen sich wertvolle Aussagen über die Oberflächenstruktur treffen; beispielsweise gibt der Durchmesser einer Kreisanordnung der Peaks die Gitterkonstante der Oberflächenstruktur an. Außerdem können über die Fouriertransformation geringe Störeffekte (wie z.B. Messunsicherheiten, ungewollte Schwingungen an der Spitze), die bei der Aufnahme durch das Rastertunnelmikroskop entstehen und die die periodische Struktur leicht verändern, wieder herausgefiltert werden.

1.3 Piezoelektrischer Effekt

Beim Piezoelektrischen Effekt wird an piezoelektrischen Festkörpern eine elektrische Spannung U erzeugt, wenn diese elastisch verformt werden. Durch Druckausübung werden elektrische Ladungen verschoben (und damit der negative und positive Ladungsschwerpunkt) und deshalb ein elektrisches Feld E in dem Körper aufgebaut. Umgekehrt können auch durch Anlegen eines elektrischen Feldes Ladungen verschoben und damit der Körper mechanisch deformiert werden (inverser piezoelektrischer Effekt). Der piezoelektrische Koeffizient δ ist eine Material- und richtungsabhängige Konstante, und der Betrag elektrische Feldstärke des Piezofeldes zwischen zwei gegenüberliegenden Seiten des Körpers errechnet sich nach:

$$E = \delta \cdot \frac{|\Delta x|}{x} = \frac{|U|}{x}.$$

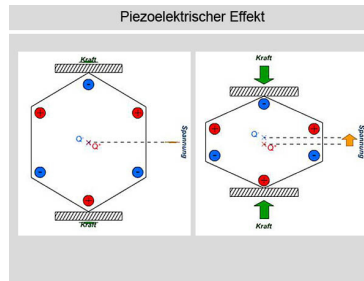


Abbildung 3: Rastertunnelmikroskop und Piezoelektrische Effekt

Bei der Tunnelspektroskopie wird der Tunneleffekt ausgenutzt und eine Auflösung im Ångström-Bereich erreicht. Ein Rastertunnelmikroskop besteht im Wesentlichen aus einer Spitze, die die Oberfläche einer Probe abfährt und einzelne Atome der Oberfläche detektieren kann. Zwischen dem Rastertunnelmikroskop und der Probe wird eine Spannung konstanten Betrags angelegt, was zu einer Differenz der Fermi-Energien führt. Es fließt nun zwischen Spitze und Probenoberfläche ein Tunnelstrom, der durch den Tunneleffekt hervorgerufen wird und empfindlich vom Spitze-Probe-Abstand abhängt. Führt die Mikroskop-Spitze nun über die Oberfläche der Probe kann der Tunnelstrom trotz konstanter Spannung variieren. Außer von der Spannung ist der Tunnelstrom noch von der Elektronen-Zustandsdichte der Graphit-Oberfläche abhängig. An Orten größerer Zustandsdichte wird auch der Tunnelstrom größer, da mehr Zustände den Elektronen für den Übertritt zur Verfügung stehen. Das Rastertunnelmikroskop funktioniert in zwei verschiedenen Modi. Zum einen kann die Höhe der Spitze konstant gehalten werden und die Veränderungen des Tunnelstroms können aufgezeichnet werden. Bei einem größeren Spitze-Probe-Abstand verringert sich der Tunnelstrom. Im zweiten Modus bleiben der Spitze-Probe-Abstand und somit auch

der Tunnelstrom konstant. Dazu muss die Höhe der Spitze sich ständig an die abzurasternde Oberfläche angepasst werden, was über einen Regelkreis zur Abstandsregelung realisiert werden kann. Die Oberflächenbeschaffenheit (genauer: Die Zustandsdichte der Elektronen auf der Graphit-Oberfläche) kann auf diese Weise direkt aufgezeichnet werden. Die sehr sensible Höheneinstellung der Spitze erfolgt über den inversen piezoelektrischen Effekt.

1.4 Regelkreis

Ein Regelkreis besteht aus mehreren Komponenten, mithilfe derer in einem Versuchsaufbau eine bestimmte Größe (Regelgröße) auf einem konstanten gewünschten Wert (Sollwert) gehalten werden kann. Dazu muss zunächst der Istwert der Regelgröße mit einer Messeinrichtung gemessen und dieser mit dem eingestellten Sollwert verglichen werden. Der Regler erfasst diese beiden Größen und leitet eine Steuergröße an eine Stelleinrichtung weiter. Diese fungiert als Leistungsverstärker und wandelt die Steuergröße in eine Stellgröße um, falls für die Regelstrecke eine Verstärkung des Signals benötigt wird. In der Regelstrecke wird die endgültige Stellgröße eingelesen und vom Stellglied umgesetzt. An dieser Stelle können Störgrößen den Messaufbau beeinflussen. Ein Regelkreis ist dauerhaft in Betrieb, wenn der Sollwert konstant bleibt und der Istwert durch Störgrößen permanent verändert wird oder auch, wenn der Sollwert einen anderen Wert annimmt. Vereinfacht kann der Regelkreis durch eine Regelstrecke, die vom Stellort zum Messort reicht, und einen Regler, der vom Messort zum Stellort verläuft, beschrieben werden. Unter einer negativen Rückkopplung im Regelkreis versteht man den Vorgang, bei dem in einem Regelkreis die Veränderung einer Größe sich so auswirkt, dass die ursprüngliche Veränderung stark gehemmt wird. Auf diese Weise stellt sich eine Stabilisierung einer Größe ein. Eine positive Rückkopplung (wie beispielsweise die akustische Rückkopplung bei einem Mikrofon) verstärkt die ursprüngliche Größe.

1.5 Struktur von einkristallinen Festkörpern und Graphit-Struktur

Kristallstrukturen von Festkörpern können mithilfe des sogenannten Punktgitters und der sogenannten Basis beschrieben werden. Das Punktgitter eines Festkörpers ist eine feste, dreidimensionale Anordnung von mathematischen Punkten. Diese Anordnung lässt sich durch ein Koordinatensystem beschreiben, indem von einem festgelegten Punkt aus, Basisvektoren zu seinen direkten Nachbar-Punkten weisen. Durch ganze Vielfache dieser Basisvektoren lässt sich nun jeder Punkt vom Punktgitter eindeutig beschreiben. Der durch diese Basisvektoren aufgespannte Raum wird Einheitszelle genannt. Ein Punktgitter ist also nichts anderes als eine dreidimensionale Anordnung von Elementarzellen. Die Einheitszelle enthält die eingangs erwähnte Basis. Eine Basis ist im Allgemeinen eine ortabhängige Eigenschaft des Kristalls. Es könnte sich hierbei um eine Elektronendichte $\rho(\vec{r})$ handeln, aber auch um den Ort verschiedener Atome

(Im Falle von Graphit wäre die Basis genau ein Kohlenstoff-Atom, welches sich genau an einen Punkt des Gitters befindet).

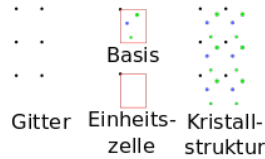


Abbildung 4: Aufbau eines Kristalls in 2D

Ist ein Punktgitter invariant gegenüber Translation, Rotation, Spiegelung und Inversion (Punktspiegelung), so handelt es sich um ein Bravais-Gitter:

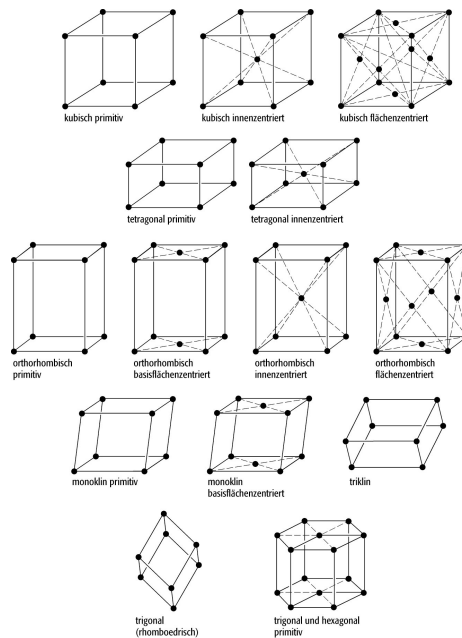


Abbildung 5: Mögliche Bravais-Gitter in 3D

Die Kristallstruktur von Graphit besteht aus über einander liegenden Schichten aus Kohlenstoff-Atomen. Die in einer Ebene liegenden Kohlenstoff-Atome sind in einem Gitter mit hexagonaler Symmetrie angeordnet. Es handelt sich nicht direkt um ein hexagonales Bravais-Gitter, da das mittlere Atom im "Bravais-Hexagon" nicht in der Graphit-Ebene vorkommt. Die Graphit-Schichten sind allerdings versetzt angeordnet, sodass eine senkrechte Blickrichtung, bezogen auf die Oberflächen, den Eindruck eines hexagonalen Bravais-Gitters erzeugt. Diese hexagonale Anordnung ist eine Folge der sp^2 -Hybridisierung der Kohlenstoff-Atome. Sie sorgt außerdem dafür, dass die Kohlenstoff-Atome kovalent gebunden sind. Laut Skript beträgt der Abstand zwischen den Ebenen

$3,35 \cdot 10^{-10}m$. Der Abstand benachbarter C-Atome innerhalb einer Ebene beträgt $1,42 \cdot 10^{-10}m$. Dieser Abstand ist mit dem STM allerdings nicht direkt sichtbar, da nur jedes zweite C-Atome abgebildet werden kann.

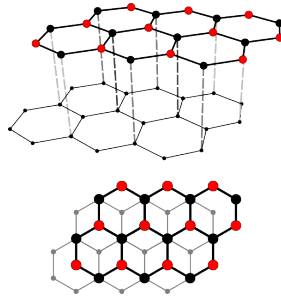


Abbildung 6: Graphit-Struktur

1.6 Elektronische Struktur von Festkörperoberflächen

An der Oberfläche eines Festkörpers wird die im Inneren vorherrschende Symmetrie gebrochen. Das führt dazu, dass Atomen Bindungspartner fehlen. Dadurch ist die Position, die sie im periodischen Festkörper einnehmen würden möglicherweise nicht mehr die energetisch günstigste. Der Verlust der Bindungspartner muss folglich kompensiert werden, wodurch sich die Oberfläche verändert. Dabei unterscheidet man zwischen Oberflächen-Relaxation und -Rekonstruktion. Bei der Relaxation bewegen sich Atome aus der Festkörperstruktur heraus oder hinein. Dadurch bleibt an der Oberfläche die Translationsinvarianz in zwei Dimensionen erhalten. Bei der Rekonstruktion ist das nicht der Fall. Hier verschieben sich die Atome und bilden eine neue Oberflächenstruktur aus, um die fehlenden Bindungen zu kompensieren. Bleibt die zweidimensionale Translationsinvarianz erhalten, finden also nur Relaxationsprozesse statt, kann man ein eindimensionales Modell der Festkörperoberfläche betrachten. Denn in den Dimensionen entlang der Oberfläche bleibt die Periodizität erhalten und über einen Separationsansatz lassen sich Bloch-Funktionen für diese Freiheitsgrade wählen. Für die verbleibende Koordinate, sei es x , ändert sich die Struktur des Potentials an der Oberfläche. Während es im Festkörper (x kleiner/gleich 0) periodisch ist, ist es für x größer 0 konstant. Wie an einer Potentialstufe oder im Inneren einer Potentialbarriere ist die Lösung der Schrödingergleichung für letzteren Bereich eine exponentiell abfallende Funktion. Für die Lösung im Inneren des Festkörpers gilt das Bloch Theorem nicht, daher ist die Lösung schwieriger.

2 Versuchsaufbau und -durchführung

Bei dem von uns in diesem Versuch benutzten Rastertunnelmikroskop handelt es sich um einen Eigenbau der Arbeitsgruppe Franke, der in einem der Labore der AG untergebracht ist. Das Mikroskop ist Schwingungs-gedämpft gelagert und mit einer Schallschutzglocke abgedeckt. Die Steuerung des Geräts erfolgt über einen Computer mit der Software WSxM. Dabei werden über Digital/Analog-Wandler die X- und Y-Piezoelemente angesteuert und mittels eines Analog/Digital-Wandlers die Spannung zur Steuerung des Z-Piezoelements gemessen, die zuvor im Regelkreis aus dem Stromsignal erzeugt wurde. Als Probe haben wir Graphit verwendet. Vor der Durchführung der Messungen musste zunächst die Spitze im Messkopf erneuert werden. Dazu wird die Spitze entnommen und mit einer Art Zange „übergraben“, sodass im günstigsten Fall eine einatomige Spitze entsteht. Mit einer Lupe kann kontrolliert werden, ob die Spitze stumpf oder spitz aussieht und so zumindest Hoffnung besteht, dass die Spitze brauchbar ist. Beim Einsetzen der Spitze in den Messkopf und des Messkopfs auf das Z-Element ist darauf zu achten, dass die Teile möglichst fest gelagert sind. Im nächsten Schritt wurde die Graphit Probe eingelegt und abgezogen, um eine möglichst glatte Oberfläche zu erreichen. Danach wird zunächst manuell und anschließend mit Hilfe eines Elektromotors die Spitze soweit an die Probe angenähert bis ein gewünschter Strom gemessen wird. Eine Kamera im Mikroskop ermöglicht die Überwachung des Prozesses. Nun kann die eigentliche Messung beginnen. Dafür sind geeignete Parameter zu wählen und eventuelle Wartezeiten zu berücksichtigen, in denen sich das Mikroskop stabilisiert (z. B. nach der Veränderung der Position des Messkopfs in X-Y Richtung). Im ersten Schritt haben wir über ein quadratisches Messfenster mit 50 nm Länge die Oberflächenstruktur (oberhalb von atomarer Auflösung) gemessen. Das Ziel dabei war Bereiche zu finden, in denen die Oberfläche Stufen hat, um anhand der gemessenen Stufenhöhen die Kalibrierung des Z-Piezoelements überprüfen zu können. Dabei haben wir verschiedene Bereiche der Oberfläche mit identischen Einstellungen des Mikroskops gescannt, bis wir genug Stufen aufgenommen hatten (laut Aufgabenstellung mindestens 20), um die Kalibrierung überprüfen zu können. Im zweiten Schritt haben das Messfenster verkleinert (ca. 2x2 nm) und versucht die atomare Struktur der Oberfläche aufzulösen. Dazu haben wir die Parameter so verändert, dass die Spitze möglichst nah an der Oberfläche misst. Dazu benötigt man einen größeren Strom und eine kleinere Spannung zwischen Probe und Spitze (Bias). Außerdem haben wir den Proportional Gain möglichst niedrig gehalten (0,06) und die Zeit pro Linie auf 0,5 Sekunden gestellt, um ein möglichst genaues Bild zu erhalten. Allerdings hat das nicht wie erhofft funktioniert, auch bei Variation der Strom- und Spannungseinstellungen. Wir haben auch negative Bias-Werte ausprobiert. Auch die Variation des Proportional Gain und der Geschwindigkeit pro Linie führte zu keinen brauchbaren Ergebnissen, weshalb wir die Auswertung zu dieser Aufgabe anhand eines Referenzdatensatzes durchführen.

3 Auswertungen

3.1 Aufgabe a

Wie müssen die Parameter geändert werden um zu höheren Scanraten und -bereichen zu kommen? Die Parameter, die wir über die Steuerungssoftware verändern konnten, waren Scanbereich in nm (Size), Speed (Anzahl Linien pro Sekunde), Bias (Spannung, mV), Set Point (Strom nA), Proportional Gain (im Bereich von 0,06-0,12) und den Z-Gain. Der z-Gain bestimmt die Größe eines Intervalls, falls die Einstellung des z-Piezos von einer Position zu einer benachbarten Position verändert wird. Es stehen 2^{16} Positionen zur Verfügung (16 Bit). Davon ausgehend, dass mit höheren Scanraten schnellere Messungen gemeint sind, lassen sich diese erreichen, in dem die Anzahl der Linien pro Sekunde erhöht wird und der Proportional Gain möglichst hoch gewählt wird. Letzteres führt dazu, dass die Höhe des z-Piezos schneller an Stromschwankungen angepasst wird. Dazu kann noch der z-Gain erhöht werden. Mit höheren Scanbereichen sind mutmaßlich Messungen mit höherer Auflösung gemeint. Sie werden erreicht, indem das Messfenster verkleinert wird und der Set Point/Strom möglichst hoch sowie der Bias möglichst niedrig eingestellt werden. Dadurch muss sich die Spitze näher an die Oberfläche bewegen. Gleichzeitig lässt sich das Signal-Rausch-Verhältnis verbessern, indem der Proportional Gain und z-Gain kleinere Werte annehmen.

3.2 Aufgabe b und c

Aufgrund der Schwierigkeiten bei der Datenerhebung nutzen wir für die Bearbeitung dieser Aufgaben die Messungen eines Referenzdatensatzes. Zur Auswertung haben wir uns folgende Messung ausgesucht:

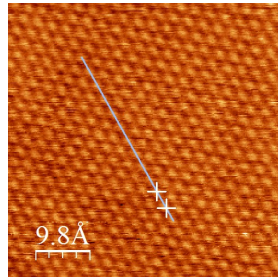


Abbildung 7: Bild der Graphit-Oberfläche in atomarer Auflösung. Entlang der eingezeichneten Gerade wird das Höhenprofil ausgewertet (siehe Abbildung 8), die beiden Kreuze sind Marker, deren Höhendifferenz und Abstand von der Auswertungssoftware berechnet werden

Entlang der eingezeichneten blauen Linie haben wir das folgende Höhenprofil der *atomaren* Erhebungen aufgezeichnet:

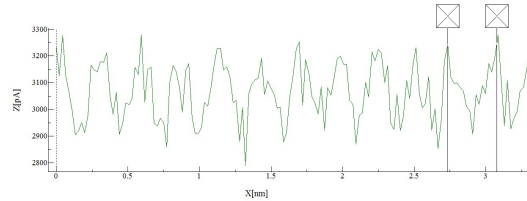


Abbildung 8: Höhenprofil der Graphit-Oberfläche aus Abbildung 7)

Um zu erkennen, dass die *atomaren* Erhebungen nur jedes zweite Atom im Graphen-Gitter darstellen, haben wir mithilfe der folgenden Rechnung den planaren Abstand y nächster Nachbarn aus den gemessenen Abständen der Spitzen des Höhenprofils x bestimmt:

$$y = \frac{x}{2 \cdot \cos(30^\circ)}.$$

Die obige Gleichung kann leicht anhand geometrischer Betrachtungen eines gleichseitigen Sechsecks nachvollzogen werden:

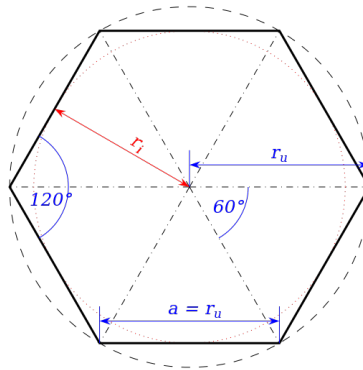


Abbildung 9: Gleichseitiges Sechseck

Aus den zehn berechneten Abständen y haben wir das arithmetische Mittel gebildet und zur Fehlerabschätzung die Standardabweichung verwendet. Unsere Auswertung ergibt für den planaren Abstand $y = (0,16 \pm 0,02)nm$. Der im Skript angegebene Wert von $y = 0,142nm$ liegt also im einfachen Fehlerintervall unseres berechneten Wertes. Wir können also demnach schlussfolgern, dass sich unsere Annahme, es würde sich bei den *atomaren* Erhebungen nur um jedes zweite Atom handeln, bewahrheitet.

Zur Bestimmung der Winkel zwischen den atomaren Richtungen wurde die Software verwendet. In dem aufgenommenen Bild wurde eine Gerade gezeichnet (langer Strich in Abbildung) und der Winkel zwischen dieser Geraden und den Geraden entlang der atomaren Richtungen gemessen. Auf diese Weise hat man totale Winkel erhalten. Mit dem Bilden von Differenzen wurden die relativen Winkel 1-6 (siehe Abbildung) errechnet. Die Winkelmessung ist fehlerbehaftet und wir schätzen den Fehler der relativen Winkel wir auf $\pm 3^\circ$. Die Symmetrie der Oberfläche und die Periodizität in die unterschiedlichen Richtungen sind deutlich zu erkennen. Die Winkel 1-6 sind nicht alle gleich. Betrachtet man das dreifache Fehlerintervall, so finden wir heraus, dass sich die Werte mit einer Ausnahme (Winkel 3 und 4) im dreifachen Fehlerintervall überschneiden, also verträglich sind. Wir erkennen eine deutliche Verzerrung der Oberflächenstruktur entlang der Winkelhalbierenden der Winkel 3 und 6. Mögliche Ursachen für diese Verzerrung könnten eine durch Lichteinfall und Erwärmung hervorgerufene thermische Ausdehnung (in die genannte Richtung), d.h. thermische Drift, oder ein, von der Kalibrierung abweichendes, Verhalten der x- und y-Piezos sein. Möglicherweise wurden diese im Verlauf des Experiments erwärmt oder über ihre Nutzungsdauer bereits stärker beansprucht, sodass sie möglicherweise nicht mehr der Kalibrierung entsprechend Spannungsunterschiede reagieren und das Bild dadurch verzerrt wird. Unregelmäßigkeiten im Graphit könnten ebenfalls Ursache sein, würden aber wahrscheinlich nicht zu dermaßen gleichmäßigen Verzerrungen führen.

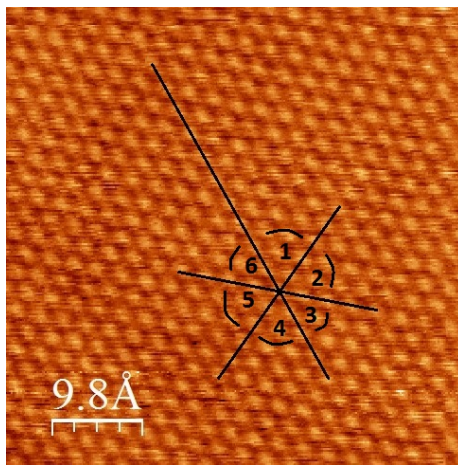


Abbildung 10: Winkelmessung zwischen den Symmetrieachsen

Zur Bestimmung der Höhe der Erhebungen haben wir folgendes Höhenprofil ausgewertet. Um die Höhe zu bestimmen haben wir als unteren Referenzwert den linken der beiden Abstandsmesser (ebenfalls zu sehen im Höhenprofil in Abbildung 11) verwendet. Die Messtabelle ist im Anhang zu finden.

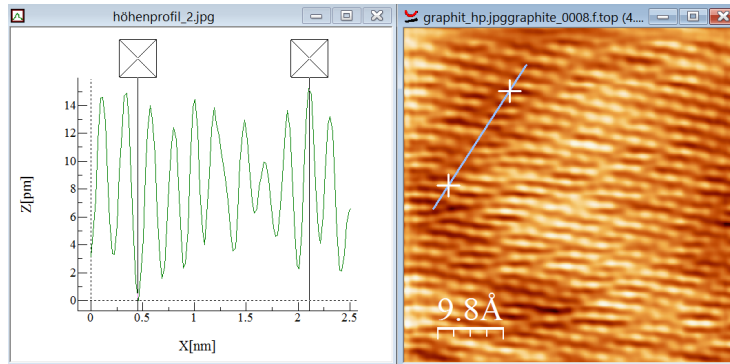


Abbildung 11: Atomare Erhebungen. Links: Höhenprofil mit Markern, Rechts: Bild des Mikroskops mit eingezeichneter Profillinie und Markerpositionen

Als Höhe h nehmen wir das arithmetische Mittel aller 12 gemessenen Höhen. Sie beträgt $h = (12 \pm 2) \text{ pm}$. Dass es sich dabei nicht um den, wie auch immer definierten, Radius eines Kohlenstoff-Atoms handeln kann, folgt bereits aus der Analyse der Abstände zweier benachbarter Erhebungen. Diese deutete daraufhin, dass vom Mikroskop jeweils zwei Atome zu einer Erhebung zusammengefasst werden. Stellt man sich dieser Erhebungen wie zwei Halbkugeln vor, deren Kugelmittelpunkte im gemessenen Spitze-Spitze-Abstands auseinander liegen, kann man verstehen wie die Höhe der Erhebungen zustande kommt, wenn man sich die Spitze ebenfalls als Kugel vorstellt. Angenommen die Spitze kann genau an einer Oberfläche konstanter Zustandsdichte entlang fahren und befände sich gerade auf der Spitze einer der Halbkugeln. Dann könnte sie an dieser nur so lange herabfahren, bis sie an die nächste Kugel stößt und an dieser wieder hinauf fahren muss. Müsste sie zusätzlich noch einen Abstand halten, würde das den effektiven Radius der Kugel nur vergrößern und sie müsste noch früher an die nächste Kugel anstoßen. Da in unserem Fall die Höhe der Erhebungen relativ klein ist (zum Vergleich: der van-der-Waals-Radius von Kohlenstoff liegt bei 170 pm), spricht dies dafür, dass die Spitze einen ziemlich großen Durchmesser hatte, also kaum in die Vertiefung zwischen zwei Erhebungen eintauchen kann. Daher stellt die gemessene Höhe nicht den Radius der Halbkugeln oder der Erhebungen dar. Vielmehr hängt h auch vom Radius der Spitze ab und erlaubt daher in diesem Fall keine Aussage über die tatsächliche Höhe einer Fläche konstanter Zustandsdichte zweier Atome (Erhebung). Die bisherigen Überlegungen, basieren außerdem auf der Annahme, dass der Aufbau vollkommen stabil steht und Bewegungen der Spitze vom Mikroskop kontrolliert werden. Vermutlich führen Schwingungen und weitere Störungen zusätzlich dazu, dass der gemessene Höhenunterschied kleiner ausfällt, als theoretisch vom Radius der Spitze her

zu erwarten wäre.

3.3 Aufgabe d

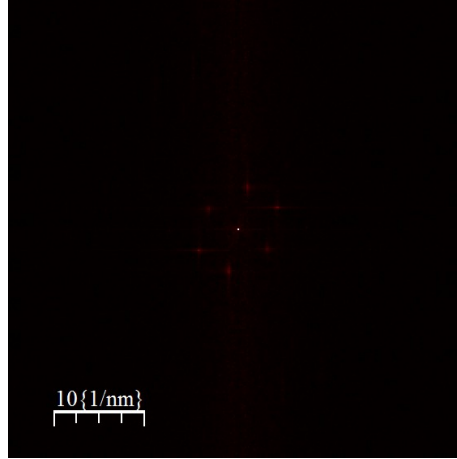


Abbildung 12: Fourier-Transformation der Graphit-Oberfläche

Die obige Abbildung zeigt die Fourier-Transformation der Graphit-Oberfläche, die in Aufgabenteil b) und c) abgebildet ist. Welche Strukturinformationen lassen sich aus dieser Transformation der Flächen konstanter Zustandsdichte in den Impulsraum ablesen? Man erkennt sechs diskrete Punkte, die in einem etwas verzerrten Kreis um den Ursprung angeordnet sind. Jeder Punkt entspricht hierbei dem Wellenvektor einer ebenen Welle mit Komponenten (k_x, k_y) , der ausgehend von einem Atom zu einem seiner sechs (abgebildeten) Nachbarn weist, wie man mit einem Blick auf die Graphit-Oberfläche erkennen kann. Wäre die Graphit-Struktur nicht verzerrt, würden sich alle Punkte im Impulsraum symmetrisch verteilt auf einem Kreis um den Ursprung liegen. Jeder Wellenvektor hätte somit auch den selben Betrag.

Zieht man einen (gedanklichen) Schnitt durch den Ursprung und die beiden Punkte auf der y-Achse (im unverzerrten Bild), so erhält man drei Deltafunktionen, die zusammen eine Funktion konstanter Zustandsdichte in einem (nun eindimensionalen) Impulsraum ergeben, die nur von k abhängt:

$\Phi(k) = \delta(k - k_r) + \delta(k + k_r) + c \cdot \delta(k)$. Dabei steht die letzte Delta-Funktion für den weißen Punkt in der Mitte des Bildes und wird in Rücktransformation zu einer Konstante im Ortsraum.

$k_r = \frac{d}{2}$, wobei d der Durchmesser des Kreises um den Ursprung, auf dem beide Punkte liegen, ist. Durch Fourier-Transformation erhält man die folgende Funktion, die Orte konstanter Zustandsdichte, im (eindimensionalen) Ortsraum zeigt:

$$\Psi(y) = 2 \cdot \cos k_r y + c$$

Diese Kosinus-Funktion muss eine Periodizität aufweisen, die der Periodizität des Bildes im Ortsraum entspricht. Also muss für die Kreisfrequenz k_r der

Cosinus-Funktion gelten $k_r = \frac{2\pi}{a}$, wobei a der Abstand zwischen zwei benachbarten Erhebungen im Ortsraum ist. Daraus ergibt sich, dass $a = \frac{2\pi}{k_r}$. Aus a lässt sich, wie oben bereits geschehen, der planare Abstand von zwei Kohlenstoff-Atomen in Graphit bestimmen. Die Überlagerung aller weiteren (eindimensionalen) periodischen Zustands-Funktionen wird periodisch sein. Dementsprechend wird es sich bei der Oberflächenstruktur um eine periodische Anordnung handeln.

3.4 Aufgabe e

Es wurden aus den vom Rastertunnelmikroskop erstellten Oberflächenbildern 20 Stufenprofile ausgewertet, um die kleinste auftretende Stufenhöhe zu erhalten und diese mit der Gitterkonstanten von Graphit zu vergleichen. Dazu wurden zunächst die auftretenden Höhendifferenzen erfasst und diese anschließend der Größe nach sortiert, also Stufennummern zugeordnet, wie im folgenden Graphen zu erkennen:

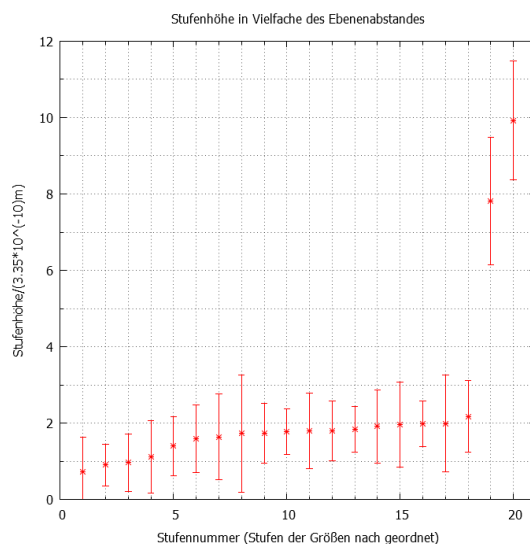


Abbildung 13: Stufenhöhen

Da die Ebenen, zwischen denen die Höhen aufgenommen wurden, nicht immer glatt waren, sind die Höhen fehlerbehaftet. Der erste Ablesefehler bezieht sich dabei auf die Unebenheit der (von links) ersten und der zweite auf die der zweiten Ebene. Wurde ein Höhenprofil mit drei Ebenen aufgenommen, so wurden zwei Höhendifferenzen gemessen. Der zweite und dritte Ablesefehler beziehen sich in diesem Fall auf die Ungenauigkeit der (von links) zweiten und dritten Ebene, also auf die zweite aufgenommene Höhendifferenz. Anschließend wurde aus den Ablesefehlern nach der Gaußschen Fehlerfortpflanzung für jede Höhendifferenz ein Gesamtfehler ermittelt:

$$\Delta_{ges} = \sqrt{(\Delta a)^2 + (\Delta b)^2}$$

Hierbei sind Δa und Δb die beiden Ablesefehler. Die nach der Größe sortierten auftretenden Höhen wurden durch die Gitterkonstante von Graphit geteilt ($d = 3,35 \text{ Angstrom}$) und gegen die sortierten Stufennummern aufgetragen (siehe Abbildung). Die Fehlerbalken sind hierbei die zu jeder Stufe ermittelten Gesamtfehler. So können wir eine Zuordnung der Stufenzahl vornehmen. Anhand des Graphen ordnen wir die ersten fünf Stufen der einfachen Gitterkonstante zu. Ausschlaggebend, warum die fünften Stufennummer zur einfachen Gitterkonstanten zugeordnet wird, ist die Tatsache, dass der Fehlerbalken weiter unter die ,1‘ als über die ,2‘ reicht. Auf die gleiche Weise ordnen wir die Stufennummern 6 bis 18 der zweifachen Gitterkonstanten zu, die Stufennummer 19 der 8-fachen und die Stufennummer 20 der 10-fachen zu. Auch wenn die relativ hohen Fehler die Zuordnungen nicht optimal und zuverlässig erscheinen lassen, so sind die meisten Stufenhöhen durch die Lage der Punkte im Graphen doch relativ eindeutig einer ganzzahlig-fachen Gitterkonstanten zuzuordnen. Wir sind mit den Messdaten daher soweit zufrieden. Fehlerquellen sind neben den Mess- und Auflösungsfehlern des gesamten Aufbaus (Ablesefehler, Spitze eventuell nicht „spitz“ genug, Ungenauigkeit und Inhomogenität des Piezos, etc.) auch möglicherweise in der Graphit-Probe selbst zu finden sein. Die Graphit-Schichten könnten auf verschiedene Weise gefaltet, vertikal deformiert sein oder könnten Luftschichten einschließen. Wenn eine Graphit-Schicht gefaltet wird, tritt an der Faltkante eine Wölbung auf, die eine Messung der Stufenhöhen stark beeinflussen kann. Des Weiteren können die Frequenzen verschiedener elektronischer Geräte in der Umgebung (Computer selbst, aber auch Leuchtstoffröhre an der Decke, etc.) die Messsensorik beeinflussen. Im Folgenden wurden die Stufenhöhen durch die zugeordnete Stufenzahl geteilt und so für jede Stufe eine mittlere Höhe einer einfachen Stufe ermittelt (siehe Tabelle). Dieser sollte im Idealfall mit der Gitterkonstanten identisch sein. Um diesen Vergleich herzustellen, wurde aus allen mittleren Höhen einer einfachen Stufe ein Mittelwert gebildet und dies als gesamte mittlere Höhe einer einfachen Stufe deklariert. Wenn h die Höhendifferenz, n die Zuordnung der Stufenzahl und $m=h/n$ die mittlere Höhe einer einfachen Stufe sind, so errechnet sich der Fehler der mittleren Höhe einer einfachen Stufe Δm nach Gauß:

$$\Delta m = \sqrt{\left(\frac{\Delta h}{n}\right)^2} = \frac{\Delta h}{n}$$

Der Fehler der gesamten mittleren Höhe einer einfachen Stufe bezeichnet den Mittelwert all dieser Werte. Als Endergebnis erhalten wir unsere errechnete Gitterkonstante mit $(3,2 \pm 0,2) \text{ \AA}$. Der Literaturwert beträgt $3,35 \text{ \AA}$ (aus FP-Anleitung/Aufgabenstellung). Bilden wir den Quotienten aus Literaturwert und experimentell ermitteltem Wert, erhalten wir $q = 1,047$ und nach Gauß

$$\Delta q = \frac{3,35}{(3,2)^2} \cdot 0,2 = 0,065.$$

Gehen wir von einer eingestellten Kalibrierung des Z-Piezos von $10nm/V$ aus, so müssen wir diesen Wert auf $10nm/V \cdot q = (10,5 \pm 0,7)nm/V$ leicht nach oben korrigieren.

4 Zusammenfassung

Zusammenfassend haben unsere Messungen und Auswertungen folgendes Bild ergeben. Aufgrund unserer selbst durchgeführten Messung verschiedener Stufenhöhen haben wir einen Korrekturfaktor für die Kalibrierung des z-Piezos errechnet: $q = 1,047 \pm 0,065$. Diesen haben wir für die weiteren Auswertungen jedoch nicht berücksichtigt, da wir diese mit einem Referenzdatensatz durchgeführt haben, der zu einem anderen Zeitpunkt gemessen wurde.

Der Abstand zwischen zwei benachbarten Erhebungen entspricht nicht der planaren Gitterkonstante von Graphit, sondern dem Abstand zwischen zwei parallelen Seiten des Hexagons. Dies ist mit der Auflösung des Mikroskops zu begründen, dass jeweils zwei Atome zu einer Erhebung zusammenfasst. Die Höhe der Erhebungen haben wir als $h = (12 \pm 2)pm$ bestimmt. Dabei kann es sich schon deshalb nicht um die Höhe einzelner Atome handeln, da diese gar nicht gemessen werden, wie soeben beschrieben. Aber auch die Höhe dieser Erhebungen wird nicht notwendigerweise gemessen. Vielmehr hängt h auch vom Radius der Spitze und der Stabilität des Aufbaus ab. Die beobachteten Verzerrungen des Bildes können vermutlich mit thermischer Drift und von der Kalibrierung abweichendem Verhalten der x- und y-Piezos erklärt werden.

Die Analyse des fourier-transformierten Bildes atomarer Auflösung ergab, dass sich die Gitterkonstante von Graphit aus dem Radius eines symmetrischen Hexagons um den Ursprung ablesen ließe, das bei der Fouriertransformation eines unverzerrten Bildes von Graphit auch entstanden wäre.