# RASTERTUNNELMIKROSKOPIE

TAMÁS GÁL<sup>1</sup>, DANIEL PAULUS<sup>1</sup> - GRUPPE 38 DES FP-08

Draft November 2008

# Zusammenfassung

Bei diesem Versuch geht es um die Untersuchung von Materialien mit Hilfe des Rastertunnelmikroskops.

Subject headings: rastertunnelmikroskop, tunneleffekt

# 1. EINLEITUNG

#### 1.1. Funktionsweise des Rastertunnelmikroskops

Das Rastertunnelmikroskop (RTM) eignet sich zur 3dimensionalen Mikroskopie von elektrisch leitfähigen Metallen bzw. Halbmetallen. Eine sehr feine Spitze, im Idealfall nur ein Atom, wird extrem dicht an die Probenoberfläche herangeführt, wobei der Abstand nur wenige Nanometer beträgt. Aufgrund des quantenmechanischen Tunneleffekts können Elektronen den Abstand zwischen Probe und Metallspitze "überspringen".

Wird zwischen den Körpern eine Spannung  $U_T$  angelegt, erhält diese Bewegung eine Vorzugsrichtung, wodurch ein Tunnelstrom  $I_T$  zu fließen beginnt. Der Strom hängt sowohl von der Elektronendichte der untersuchten Stell ab als auch vom Abstand zwischen Metallspitze und Probe. Entscheidend hierfür ist die exponentielle Abhängigkeit des Tunnelstroms vom Abstand zwischen den Elektronen.

Die atomare Auflösung einer Probe wird somit möglich, da effektiv nur das vorderste Atom der Spitze zum Tunnelstrom beiträgt. (Fig. 1) Um ein Bild der Probe zu erhalten, wird die Spitze rasterförmig drübergeführt.

## 1.2. Tunneleffekt

Der angesprochene Tunneleffekt ist ein quantenmechanischer Effekt, der Teilchen die Überwindung endlicher Potenzialbarrieren erlaubt, welche nach der klassischen Physik als unüberwindbar gelten, da die Energie der Teilchen kleiner als die Barrierenhöhe ist. Den einfachsten Fall einer rechteckigen Barriere zeigt Fig. 2. Die Tunnel-



FIG. 1.— Rastertunnelmikroskopie

<sup>1</sup> Student (Dipl. Phys.) - Department of Physics - University Erlangen-Nuremberg, Schlossplatz 1, 91054, Germany Electronic address: tamas.gal@physik.stud.uni-erlangen.de



FIG. 2.— Tunneleffekt beim Rastertunnelmikroskop: reckteckige Potenzialbarriere. Die Energie E ist hier kleiner als die Barrierenhöhe  $\phi$ . Im unteren Bereich ist der Verlauf der Aufenthaltswahrscheinlichkeit  $|\psi(z)|^2$  eingezeichnet.



FIG. 3.— Tunneleffekt beim Rastertunnelmikroskop: realer Kontakt im Rastertunnelmikroskop. Die Indizes S und P bezeichnen die Größen der Spitze bzw. Probe. Das Potenzial ist aufgrund von Bildladungen abgerundet.

wahrscheinlichkeit T (für  $E \ll U_0$ ) ist gegeben durch

$$T(E) \approx \exp\left\{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m[\psi-E]}s\right\}$$

Dabei ist  $\phi$  die Barrierenhöhe, E die Energie des Teilchens und s der Tunnelabstand. Die Wahrscheinlichkeit, dass ein Teilchen durch diese Barriere hindurchgelangt, hängt exponentiell von der Dicke der Barriere und der Wurzel der Barrierenhöhe ab. Für beliebig geformte Potenzialbarrieren  $\Phi(z)$  (siehe Fig. 3) liefert die Wentzel-Kramers-Brillouin-Näherung (WKB) im quasi klassischen Grenzfall (Potenzial variiert langsam im Vergleich zur Wellenlänge des Teilchens):

$$T(E) \approx \exp\left[-\frac{2}{\hbar} \int_{z_1}^{z_2} \sqrt{2m[\psi - E]} dz\right]$$



FIG. 4.— Der elektrische Regelkreis eines Rastertunnelmikroskops



FIG. 5.— Falsche Einstellung des Reglers. Links: Regler zu langsam Scan zu schnell, Rechts: Regler zu schnell, Schwingneigung

#### 1.3. Regelkreis

Ein elektrischer Regelkreis sorgt dafür, dass der Abstand der Tunnelspitze zur Probenoberfläche und damit der Tunnelstrom konstant gehalten wird. Der Regelkreis misst den momentanen Tunnelstrom (Ist-Wert) und vergleicht ihn mit dem vorgegeben Wert (Soll-Wert). Falls diese voneinander abweichen, versucht der Regelkreis die Differenz zu eliminieren, indem er den Abstand der Spitze über der Probe verändert.

Die Regelgeschwindigkeit lässt sich über zwei Regelparameter beeinflussen, den ingegralen Anteil (I) und den proportionalen Anteil (P). Der P-Teil legt fest, wie stark proportional der Regler auf Abweichungen reagiert, wobei ein hoher P-Wert eine starke Reaktion des Regels bedeutet. Mit dem I-Teil wird hauptsächlich die Geschwindigkeit, mit der der Regel auf Abweichungen reagiert, bestimmt. Große I-Werte bedeuten eine hohe Geschwindigkeit. (siehe Fig. 4) Eine falsche Einstellung des Reglers führt zur Verzerrung des Bildes, wie man es in Fig. 5 erkennen kann. Das Linke Bild zeigt einen Regelvorgang, bei dem der Regler zu langsam arbeitet und der Scan zu schnell erfolgt. Beim rechten Bild ist der Regler zu schnell und neigt aufgrund der Wechselwirkungen mit Nachbaratomen zu schwingen. Die blaue Linie zeigt die Oberfläche, die rote die ideale Regellinie und die schwarze Linie ist das tatsächliche Regelverhalten.

#### 1.4. Piezoelektrische Steuerelemente

Die Änderungsvorgaben des Reglers werden aufgrund der mikroskopischen Abmessungen über Piezoelemente, welche die Tunnelspitze in x-, y- und z-Richtung bewegen, auf den Tunnelabstand übertragen. (siehe Fig. 6) Piezoelemente sind winzige piezoelektrische Keramiken, die bei angeregter Spannung ihre geometrische Ausdehnung verändern können (Piezoelektrischer Effekt). Mit solchen Bauteilen lassen sich mechanische Bewegungen vom sub-Angström-Bereich bis hin zu etlichen  $10\mu m$ realisieren. Mit ihnen wird einerseits die Tunnelspitze in konstanem Abstand über der Probenoberfläche gehalten, andererseits wird die Spitze gleichzeitig in xy-Richtung über der Probe gerastert, daher der Name **Ras**tertunnelmikroskopie.



FIG. 6.— Anordnung der Piezoelemente. Mit diesen Bauteilen lässt sich die Spitze des Rastertunnelmikroskops mit << Å Auflösung steuern

#### 1.5. Topographiemessung mit dem Rastertunnelmikroskop

Ein Rastertunnelmikroskop ermöglicht es die Oberfläche eines elektrisch leitfähigen Probe mit einer Auflösung bis in den Subnanometerbereich räumlich abzubilden. Die Probe selbst ist wie oben bereits beschrieben, einer der beiden Tunnelkontakte. Der elektrische Gegenpol (Sonde) stellt die Metallspitze des RTM dar. Die zwischen den beiden Kontakten anliegende Tunnelspannung  $U_{bias}$ , welche bei genügend kleinem Abstand die Ausbildung eines Tunnelströmes ermöglicht liegt im Bereich von wenigen mV bis zu einigen Volt. Die Tunnelströme betragen einige nA bis wenige  $\mu A$ . Der elektrische Widerstand eines solchen Tunnelkontaktes liegt demnach im Bereich von  $k\Omega$  bis  $M\Omega$ .

Es gibt generell zwei verschiedene Arten von Messmethoden, den Constant-Current-Mode und den Constant-Height-Mode.

## 1.5.1. Constant-Current-Mode

Bei diesem Modus (siehe Fig. 7) wird die Sondenspitze über die Probe bewegt, wobei der Regler auf topographische Unebenheiten reagiert und folgt der Oberflächenkontur der Probe, wegen der Vorgabe konstanten Tunnelstroms. Somit erhält man zu jedem (x,y)-Punkt des Rasters eine Höheninformation in z-Richtung. Diese Koordinaten ergeben eine Abbildung der Fläche konstanten Tunnelstromes, welche die topographische Abbildung der Oberfläche näherungsweise wiedergibt.

Die Regelparameter hierbei sind die bereits erwähnten I-Gain (Integralteil) und P-Gain (Proportional-Teil). Diese müssen den topographischen Gegebenheiten derart angepasst werden, dass der Regler schnell genug ist allen Oberflächenunebenheiten zu folgen, und dass auch genügend "Dämpfung" vorhanden ist um Schwingungen bzw. Überschwingungen (siehe Fig. 5) zu unterdrücken. Der Constant-Current-Mode ist besonders dann notwendig, wenn topographische Strukturen auf der Oberfläche schon wenige nm übersteigen.

#### 1.5.2. Constant-Height-Mode

Bei diesem auch Konstanthöhenmethode genannten Modus (siehe Fig. 8) werden die Regelparameter derart



FIG. 7.— Darstellung des Constant-Current-Mode



FIG. 8.— Darstellung des Constant-Height-Mode

angepasst, dass der Regler nur sehr träge auf Änderungen im Tunnelstrom reagiert. Um Höheninformationen zu erhalten, werden in diesem Fall die sich augenblicklich ändernde Tunnelströme verwendet. Da das Regelverhalten in z-Richtung bei dieser Methode äußerst langsam ist, eignet sich dieser Modus nur für die Vermessung sehr geringer topographischer Unebenheiten, wie beispielsweise bei Graphit.

Die Vorteile liegen in der deutlich höheren Scangeschwindigkeit, da von einem Messpunkt auf den anderen kaum



 ${\rm Fig.}$ 9.— Frequenzänderung bei Schichtdickenänderung verschiedener Materialien

auf ein Regelgleichgewicht bezüglich der z-Richtung abgewartet werden muss. Der Tunnelstrom hingegen dient ohne jegliche Zeitverzögerung als Mass für den Abstand bzw. Höhe.

## 1.6. Schichtdickenmessung mit Hilfe eines Schwingquarzes

Bei der Schichtdickenmessung mit einem Schwingquarzmessystem nutzt man die Eigenschwingung eines Quarzkristallplättchens aus. Dieses Plättchen wird aus einem Quarzeinkristall in einer bestimmten Orientierung herausgeschnitten (sogenannter AT-Schnitt), wodurch eine große Änderung der Eigenfrequenz  $\Delta f$  der Dickenschwingung aufgrund einer Änderung der Dicke  $\Delta d_s$  des Quarzplättchens eintritt. Ein weiterer Vorteil des AT-Schnitts ist der niedrige Temperaturkoeffizient, welcher eine geringere Temperaturempfindlichkeit verursacht. Dies ist von großer Bedeutung, da die Temperatur am Messquarz trotz Kühlung schwanken kann. Die Frequenzveränderung lässt sich mit folgender Formel berechnen

$$\frac{\Delta f}{f_0} = -\frac{\Delta d_S}{d_Q} = -\frac{\Delta m}{\rho_S A_S} \frac{1}{d_Q}$$

Hierbei steht  $\Delta d_s$  für die eben erwähnte Schichtdickenänderung,  $d_s$  für die Dicke des Quarzplättchens,  $\rho_S$  für die Dicke des Beschichtungsmaterials,  $A_S$  für die Fläche des bedampften Quarzplättchens und  $\Delta m$  für die Masse des Schichtmaterials auf der Fläche des bedampften Quarzplättchens. Die Schichtdicke berechnet sich dann mit

$$\Delta d_S = \frac{\Delta m}{\rho_S A_S}$$

Fig. 9 zeigt die Frequenzveränderung bei Schichtdickenzunahme verschiedener Materialien. Diese Messmethode bietet gegenüber anderen Methoden einige Vorteile:

- eine kontinuierliche Messung während der Schichtenherstellung
- deckt einen vergleichsweise relativ großen Messbereich ab; Dickenbereich von 0.3nm bis  $3\mu m$
- Dickenmessungen von Dielektrika-, Halbleiter- und Metallschichten in beliebiger Aufeinanderfolge
- robuster mechanischer Aufbau.



FIG. 10.— Bänderschema - Nichtleiter, Halbleiter und Leiter



FIG. 11.— Bänderschema -  $E_F$  bezeichnet die Fermienergie, auf der x-Achse ist der  $\vec{k}$ -Vektor aufgetragen.

#### 1.7. Elektronische Bandstruktur

Die Darstellung mittels des Bändermodells ist ein wichtiges Modell in der Festkörperphysik. Hierbei wird das Material mittels eines Bänderschemas in Form von Energiebändern dargestellt. Es wird im allgemeinen zwischen Valenz- und Leitungsband unterschieden, wobei der Abstand dieser beiden Bänder Auskunft über die Art und Leitfähigkeit des Materials gibt.

Man unterscheidet generell zwischen Isolator, Halbleiter und Leiter. Bei einem Isolator ist der Abstand zwischen Leitungsband und Valenzband sehr gross, weshalb keine Leitfähigkei entstehen kann. Bei einem Leiter hingegen existiert keine Bandlücke, wodurch die Ladungsträger aus dem Valenzband leicht in das Leitungsband gelangen können. Halbleiter stellen die Zwischenstufe dar, die Bandlücke ist zwar vorhanden, allerdings gelingt es einigen Ladungsträgern die Lücke unter bestimmten Bedingungen zu überwinden. Siehe hierzu Fig. 10.

Betrachtet man nun zwei sich aufeinander zu bewegende Atome, so erkennt man mit abnehmendem Abstand eine Aufspaltung der Energieniveaus. Diese neu geformten Energiebänder entstehen durch eine Überlappung der Aufenthaltswahrscheinlichkeiten der Elektronen. (siehe Fig. 11)

## 1.8. Kristall- und Bandstruktur von Graphit

Fig. 12 zeigt die Struktur von Graphit. Man erkennt neben die aufeinander liegenden Schichten, die aus hexa-



FIG. 12.— Struktur von Graphit



FIG. 13.— Struktur von Gold

gonal verbundenen Kohlenstoffatomen bestehen. Die Bindung zwischen den einzelnen Schichten ist sehr gering, weshalb wir bei unserem Versuch die Graphit-Probe mit einem Klebenstreifen präparieren können. Hierzu nehmen wir einen Streifen Tesa-Film und kleben ihn auf die Graphit-Probe. Beim abziehen des Klebestreifens werden einige hundert Schichten Graphit abgezogen und man erhält eine frisch präparierte Probe ohne große Unebenheiten.

#### 1.9. Kristall- und Bandstruktur von Gold

Die Kristallstruktur von Gold (AU(111)) ist die kubisch dichteste Kugelpackung<sup>2</sup>. Die dichteste Kugelpackung ensteht durch die Stapelung von hexagonalen Kugelschichten, das bedeutet, dass jede Kugel (also Atomkern) von sechs anderen Kugeln umgeben ist. Diese Schichten werden so versetzt gestapelt, dass die Kugeln einer Schicht über den Lücken der vorangehenden Schicht liegen (siehe Fig. fig:gold2).

Bei der kubisch dichtesten Kugelpackung ist die Schichtfolge ABCABCAB...Die Raumerfüllung, d.h. das Verhältnis des Volumens der Atome, die sich in einer Elementarzelle befinden, zum Gesamtvolumen der Ele-

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> fcc., "face-centered cubic"



FIG. 14.— Spacefill-Modell der kubisch dichtesten Kugelpackung



FIG. 15.— Draht-Modell der kubisch dichtesten Kugelpackung

mentarzelle beträgt hierbei 74%.

## 1.10. Wachstum

Laufen Wachstumsprozesse nicht im thermodynamischen Gleichgewicht ab, so wird ads Wachstumsverhalten entscheidend von der Kinetik bestimmt. Für das Wachstum dünner Filme gehören grundlegende atomare Prozesse, wie:

- Kondensation der Absorbatome aus der Gasphase
- Oberflächendiffusion
- Keimbildung von zwei- oder dreidimensionalen Clustern
- Anlagerung der Adatome an Adsorptionsplätze
- Desorption.

Siehe hierzu Fig. 16

#### 1.10.1. Deposition

Die Aufdampfrate R der aus der Gasphase adsorbierten Teilchen lässt sich aus der kinetischen Gastheorie ableiten:

$$R = \frac{p}{\sqrt{2\pi m k_B T}}$$

wobei p der Gasdreuk, m die Atommasse,  $k_B$  die Boltzmann-Konstante und T die Gastemperatur bezeichnen. In der Anfangsphase der Deposition bilden



FIG. 16.— Schematische Darstellung von Kondensation der Absorbatome aus der Gasphase, Oberflächendiffusion, Keimbildung von zwei- oder dreidimensionalen Clustern, Anlagerung der Adatome und Adsorptionsplätze und Dispersion.

sich einzelne Adatome, deren Oberflächendichte linear mit der Zeit t steigt: n = Rt.

#### 1.10.2. Desorption

Nach dem Auftreffen kann ein Atom nach einer Verweildauer  $\tau$  wieder desorbieren. Die Verweildauer  $\tau$  kann durch eine Arrhenius-Gleichung beschrieben werden:

$$\tau = \tau_0 \cdot e^{E_{Des}/k_B T}$$

Dabei ist  $\tau_0$  ein präexponentieller Faktor in der Größenordnung von  $10^{-14}s$  und  $E_{Des}$  die Aktivierungsenergie der Desorption. Die Desorptionsrate steigt mit zunehmender Temperatur und kann einen Wert erreichen, der gleich der Adsorptionsrate ist.

Unter Molecular Beam Epitaxy Wachstumsbedingungen ist sie bei der Raumtemperatur jedoch klein gegenüber der Aufdampfrate und kann meistens vernachlässigt werden.

## 1.10.3. Oberflächendiffusion

Nach dem Auftreffen der Teilchen wird ihre transiente Energie, zu der die Absorptionsenergie und die kinetische Energie beitragen, an das Substrat abgeführt. Dies geschieht im Allgemeinen innerhalb weniger Spünge an der Oberfläche.

Nach vollständiger Abgabe der transienten Energie sind die Teilchen jedoch nicht streng lokalisiert, sondern bewegen sich zwischen benachbarten Adsorptionsplätzen, wobei sie die Potentialbarrieren des periodischen Oberflächenpotentials überwinden. Dabei wird die Energie durch die thermischen Vibrationen des Substrates geliefert. Man spricht dann von intrinsischer Diffusion.Die entsprechende Diffusionskonstante D kann ebenfalls mittels einer Arrhenius-Gleichung beschrieben werden:

# $D = D_0 \cdot e^{-E_{Diff}/k_B T}$

wobei  $E_{Diff}$  die Aktivierungsenergie der Diffusion und  $D_0$  ein präexponentieller Faktor ist.

## 1.10.4. Keimbildung

Während der Oberflächendiffusion kann es zu einem Zusammentreffen einzelner Adatome kommen, was zur Bildung von Clustern führen kann. Dadurch wird die freie Oberflächenenthalpie verändert. Bei einer bestimmten Clustergröße erreicht die Veränderung der Enthalpie einen Höchstwert. Ein Cluster dieser Größe wird kritischer Keim genannt.

Bei Clustern, die kleiner sind als der kritische Keim, ist die Wahrscheinlichkeit einer weiteren Anlagerung von Adatomen kleiner als für die Ablösung von Atomen. Dies führt im statistischen Mittel zu einem Zerfall dieser Cluster. Sind die Cluster größer als der kritische Keim, so sind sie stabil, und es kommt zu einer Zunahme der Clustergröße durch ständige Anlagerung neuer Atome. In den meisten Fällen hängt die Größe des kritischen Keims hauptsächlich von der Oberflächentemperatur und von der Aufdampfrate ab.

#### 1.10.5. Anlagerung an Stufenkanten

Auf einer flachen Terrasse können sich die Adatome so lange von einem Adsorptionsplatz zum anderen bewegen bis sie z.B. auf eine aufsteigende Stufenkante stoßen. Aufgrund der höheren Koordination sind die Adatome an einer aufsteigenden Stufenkante stärker gebunden als auf einem Terrassen-Adsorptionsplatz.

Bei ausreichend hohen Temperaturen können die Adatome auch entlang der Stufenkante diffundieren oder sich von der Stufenkante lösen und auf die Terrasse zurückkehren.

## 1.10.6. Interdiffusion

Trifft ein Adatom auf eine abfallende Stufenkante, so versucht es, auf die tiefer liegende Terrasse zu gelangen, um einen energetisch günstigeren Adsorptionsplatz einzunehmen. Dazu muss jedoch meistens eine zusätzliche Energiebarriere  $\Delta E_S$  überwunden werden, die auch als Ehrlich-Schwoebel-Barriere bekannt ist. Ihre Ursache wird in der Verringerung der Koordinationszahl gegenüber der Stufenunterkante gesehen. Es besteht auch die Möglichkeit, dass die Diffusion in umgekehrter Richtung stattfindet, d.h. aus den tieferen in die höher liegenden Lagen. In beiden Fällen handelt es sich um Interdiffusionsprozesse.

Ein Spezialfall der Interdiffusion ist die Segregation von Substratatomen an die Filmoberfläche. Die Filmmorphologie entsteht demnach als Folge der Konkurrenz zwischen diesen Prozessen und wird von den experimentellen Bedingungen, wie z.B. der Oberflächentemperatur, der Aufdampfrate und den Substrateigenschaften (Korrugation und Symmetrie des Oberflächenpotentials, Gitterkonstante, Oberflächenenergie, etc.) stark beeinflusst. Ähnlich wie bei den thermodynamischen Überlegungen, kann auch bei der Betrachtung der kinetisch bestimmten Wachstumsprozesse zwischen drei Wachstumsmodi unterschieden werden, 3D-Wachstum, 2D-Wachstum und 2D/3D-Wachstum.

Beim idealem **2D-Wachstum** (Lagenwachstum) ist der Massentransport in der obersten Schicht so groß, dass stets diese Lage gefüllt wird, bevor Nukleation in der folgenden Lage eintritt. Für gestufte Oberflächen kann ein lagenweises Wachstum auch durch Stufenwanderung erreicht werden. Dabei ist die Beweglichkeit der Atome auf den einzelnen Niveaus so groß, dass sie vor einer möglichen Nukleation stets eine Stufenkante erreichen. Im Experiment wird in der Regel ein nicht ideales 2D-Wachstum beobachtet: Bevor eine Schicht vollständig aufgefüllt ist, kommt es zur Keimbildung in der nächsten Lage.

Beim idealen **3D-Wachstum** gibt es keinen Massentransport zwischen den Schichten. Es wurde gezeigt, dass diese Form des Wachstums zu einer Verteilung der unbedeckten Flächen der unterschiedlichen Kristallebenen gemäß einer Poisson-Verteilung führt. Bedingt durch einen veränderten Einfluss des Substrates auf die Oberfläche (z.B. Veränderung der Oberflächenstruktur oder Oberflächenspannung) kann es bei einer gewissen Schichtdicke zu einem Übergang vom **2Dzum 3D-Wachstumsmodus** kommen. Unter bestimmten Bedingungen, wenn die Adatome mobil sind, die Stufenkantenbarriere jedoch nicht überwinden können, bilden sich auf der Oberfläche breite, pyramidenförmige, geordnete Strukturen. Man spricht von einem instabilen Wachstumsmodus.

#### 2. AUSWERTUNG

Bei unserem Experiment haben wir zwei verschiedene Proben, nämlich Gold und Graphit mit dem Rastertunnelmikroskop untersucht. Am zweiten Versuchstag stellten wir fest, dass bei der Bedampfung der Goldprobe ein Fehler unterlaufen ist, weshalb wir die Prozedur unter beschleunigten Bedingungen wiederholt haben, wodurch natürlich die Probe nicht ganz so optimal Vorbereitet wurde wie üblich. Ausserdem haben wir nur eine Raumtemperaturprobe erstellen können, da der Glühwendel kaputt war und wir keinen Ersatz auf die schnelle auftreiben konnten. Um die Übersicht zu gewähren, hält sich die Auswertung nicht an den zeitlichen Ablauf des Experiments.

## 2.1. Präparation der Proben

Das gesamte Experiment hängt natürlich von den zu untersuchenden Proben ab, deshalb ist es äußerst wichtig diese sorgfältig zu präparieren und zu Behandeln.

#### 2.1.1. Graphit

Bei der Präparation der Graphitprobe geht es darum, eine saubere, möglichst planare Oberfläche zu erhalten, in dem man einen Klebestreifen – in unserem Fall Tesafilmstreifen – vorsichtig auf die Probe drückt und mit einer moderaten Geschwindigkeit abzieht. Graphit besteht aus dünnen Schichten und aus diesem Grund erlaubt uns diese Methode die Oberflächenschichten mittels eines Tesafilmstreifens abzutragen. Der Vorgang wird so oft wiederholt, bis man mit bloßem Auge keine Strukturen mehr auf der Oberfläche erkennt. In unserem Fall haben wir uns mit wenigen kleinen "Kratern" abgefunden. Hier muss man bei der späteren Untersuchung darauf achten, dass man die Spitze des Rastertunnelmikroskops nicht an diesen unregelmäßigen Sturkturen "zerstört".

#### 2.1.2. Gold

Gold unterscheidet sich grundsätzlich von Graphit, weshalb wir hier auf eine deutlich kompliziertere Technik zurückgreifen müssen, um eine passable Probe zu erhalten. Hierzu verwenden wir eine Vakuumkammer, in der wir das Gold auf den Glasträger aufdampfen. Der Glasträger wird in der Vakuumkammer zusammen mit einem Schwingquarz bedampft, welcher – wie bereits in der Vorbereitung diskutiert – dazu dient die Schichtdicke des Goldes zu bestimmen. Demnach berechnet sich die Frequenzdifferenz  $\Delta f$  aus:

$$\Delta f = -\frac{f_0 \rho_g}{\rho_g d_0} \Delta d$$

wobei  $\rho_g$  die Dichte des Goldes,  $\rho_q$  die Dichte des Quarzes und  $d_0$  die Dicke des unbedampften Quarzplättchens



FIG. 17.— Ein Scan von der Goldprobe mit einer schlechten Spitze. Man erkennt deutlich die "Doppelbilder" der einzelnen Strukturen.

bezeichnen. Die Verdampfung des Goldes geschieht über Erhitzen eines kleinen Behälters in dem sich eine kleine Menge an Gold befindet. Die Temperatur lesen wir mit Hilfe eines Thermoelements ab und regulieren sie über den Strom der durch den Verdampfbehälter fließt. Die Ausgangsfrequenz des Quarzplättchens – vor der Shutteröffnung – betrug 5869.000 kHz, die Frequenz nach der Bedampfung 5855.000 kHz, wobei der gesamte Vorgang 1083 s gedauert hat. Wir hatten also eine Bedampfungsgeschwindigkeit von 12.93 Hz/s.

Um die Anzahl der aufgedampften Goldschichten zu berechnen, wenden wir die oben erwähnte Formel an. Eine weitere Methode die Schichtdicke zu bestimmen, ist das Script auf der Homepage der TU-Wien<sup>3</sup>. Das Script berechnet eine Frequenzänderung pro aufgedampfter Monolage, welche bei Gold 235.5 pm dick ist. Diese beträgt demnach 36.55 Hz/ML, unsere Probe besitzt also eine Schichtdicke von etwa 383 ML bzw. 90nm. Die Oberfläche ist 111-Orientiert, wobei die Goldatome als fcc-Gitter angeordnet sind.

Bei diesem Verfahren gibt es einige Ungenauigkeiten vor allem bezüglich der Temperatur. Die Eigenfrequenz des Quarzplättchens ist temperaturabhängig, welche wir bei der Rechnung nicht berücksichtigt haben, ausserdem bilden sich in der Versuchsanordnung Temperaturgradienten aus und unser Thermoelement misst nur lokale Temperaturen.

#### 2.1.3. Herstellung der Spitze

Das Rastertunnelmikroskop benutz für die Abtastung eine sehr feine Spitze, die vor Versuchsbeginn sorgfälltig hergestellt werden muss. Eine optimale Spitze besitzt nur ein einzelnes Atom an der höchsten Stelle, welches man zum abtasten verwendet. Dies ist in der Praxis nur äußerst schwer zu realisieren – vor allem mit den von

<sup>3</sup> http://www.iap.tuwien.ac.at/www/surface/script/surfcryst.html

Tip Current - Scan forward

FIG. 18.— Topographiemessung im CC-Mode bei der Graphitprobe. Der Scan zeigt einen Ausschnitt von 3.74  $nm \times 3.74 nm$ , die Länge des Pfeils l = 3.05 nm und die Anzahl der darunterliegenden Atome n = 15. Der gemessene Atomabstand beträgt  $d_m = 0.203(008) nm$ .

uns genutzten Werkzeugen. Zur Herstellung der Spitze nehmen wir als Rohling ein Stück Draht aus Wolfram, welches wir mit einer Zange festhalten und das Ende mit einem Seitenschneider schräg, mit einem leichten Zug parallel zum Draht abzwicken.

Es erfordert einiges an Geschick und leider stellt sich erst dann heraus, ob die Spitze geeignet ist, nachdem man die ersten Scans gemacht hat. Fig. 17 zeigt zum Beispiel eine schlechte Spitze, die aufgrund der "Stumpfheit" Geisterbilder scant. Diese sind quasi Doppelbilder der Strukturen, da nicht nur das oberste Atom den Tunnelstrom transportiert, sondern auch Nachbaratome die fast in gleicher Höhe liegen.

## 2.2. Eichung der Piezoelemente

Beim Rastertunnelmikroskop wird die Spitze – wie bereits in der Vorbereitung erwähnt – von Piezoelementen gesteuert, die in x-, y- und z-Richtung steuern können. Die Steuerung in z-Richtung wird jedoch nur beim CC-Mode (constant current) benötigt, beim CH-Mode (constant height) wird diese Abgeschaltet und der Abstand konstant gehalten.

Die Piezoelemente ändern die Position der Spitze durch die Spannung die an ihnen anliegt. Der Zusammenhang zwischen der Auslenkung und der angelegten Spannung wird durch Eichmessungen genauer bestimmt, wobei wir Effekte wie Hysterese bewusst vernachlässigen.

## EICHUNG IN X- UND Y-RICHTUNG

Wir gehen bei der Eichung in der x - y-Ebene von identischen Faktoren für die beiden Richtungen aus. Zunächst macht man sich grundsätzliche Gedanken darüber, was das Rastertunnelmikroskop überhaupt an Informationen über die Struktur und Anordnung der Atome an uns übermittelt.



FIG. 19.— Topographiemessung im CC-Mode bei der Graphitprobe. Der Scan zeigt einen Ausschnitt von 3.74  $nm \times 3.74 nm$ , die Länge des Pfeils l = 3.32 nm und die Anzahl der darunterliegenden Atome n = 16. Der gemessene Atomabstand beträgt d = 0.207(008) nm.

Die Graphitprobe zeigt beim Scan nur die Atome, die kein Nachbaratom in der nächst tieferen Schicht besitzen, wodurch wir die typische hexagonale Struktur nicht erkennen. Anders ist es bei der Goldprobe, hier können wir einzelne Atome schlicht und einfach nicht auflösen.

#### *GRAPHITPROBE*

Für die Eichung in x - y-Richtung benutzen wir also die Graphitprobe und betrachten hierzu Aufnahmen von  $\approx 10 \ nm^2$ , also in atomarer Auflösung, jeweils im CCund im CH-Modus. Aus den Aufnahmen können wir die Atomabstände ermitteln und durch direkten Vergleich mit dem Literaturwert einen Eichfaktor

$$\xi = \frac{d_l}{d_m}$$

berechnen, wobei  $d_l = 0.142 \ nm$  den Literaturwert des atomaren Abstands und  $d_m$  den gemessenen atomaren Abstand bezeichnen. Zur Berechnung der Daten, Messen wir in den Aufnahmen die Länge l einer Atomreihe, wobei wir als Fehler den zweifachen Ablesefehler der Atomposition = 0.08 nm annehmen, und zählen die Anzahl n der Atome.

Eine Aufnahme ist 256  $px \times 256 px$  groß und erlaubt bei einem Ausschnitt von  $\approx 10 nm^2$  die Bestimmung der Position eines Atoms auf etwa 3 px=0.04 nm genau.

Fig. 18 und Fig. 19 zeigen die Messungen im CC-Mode, Fig. 20 und Fig. 21 die im CH-Mode. Es ergibt sich für den gemessenen Atomabstand im CC-Mode ein Wert von  $d_m \approx 0.205(008) \ nm$  und im CH-Mode ein Wert von  $d_m \approx 0.191(008) \ nm$ . Der mittlere gemessene Atomabstand ist also  $d_m \approx 0.198(008) \ nm$ . Der Eichfaktor in x - y-Richtung ergibt sich dann aus der oberen Formel



FIG. 20.— Messung CH-Mode bei der Graphitprobe. Der Scan zeigt einen Ausschnitt von  $3.00 \ nm \times 3.00 \ nm$ , die Länge des Pfeils  $l = 2.04 \ nm$  und die Anzahl der darunterliegenden Atome n = 10. Der gemessene Atomabstand beträgt  $d_m = 0.204(008) \ nm$ .



FIG. 21.— Messung CH-Mode bei der Graphitprobe. Der Scan zeigt einen Ausschnitt von  $3.00 \ nm \times 3.00 \ nm$ , die Länge des Pfeils  $l = 2.84 \ nm$  und die Anzahl der darunterliegenden Atome n = 16. Der gemessene Atomabstand beträgt  $d_m = 0.178(008) \ nm$ .

zu

$$\xi = \frac{d_l}{d_m} = 0.717(028)$$

# 2.2.1. Gültigkeit der Eichung

Wir haben bei der Eichung diverse Faktoren nicht berücksichtigt, unter anderem Hysterese und die Temperaturabghängigkeit. Ausserdem gingen wir von linearen Fehlern aus, und machten auch keinen Unterschied zwischen den Eichfaktoren für x- und y-Richtung. Die Genauigkeit von  $\xi$  verringert sich also.



FIG. 22.— Topographie-Scan der Goldprobe. Der Scan zeigt einen Ausschnitt von 15.1  $nm \times 15.1 nm$ . Man sieht deutlich zwei Terassen in der unteren Bildhälfte, wovon wir die Höhe vermessen haben. Das schwarze Dreieck auf der rechten Seite deutet die horizontale Linie an, durch die wir vom Programm NanoSurf ein Höhenprofil aus der Raw-Data erstellen lassen.



FIG. 23.— Der Graph zeigt das Höhenprofil der in Fig. 22 vermessen<br/>en Terassenhöhe. Der kürzeste Abstand der beiden schrägliegenden parallelen und gestrichelten Linien beträgt<br/>  $\delta_m=243(016)\ pm$ 

# EICHUNG IN Z-RICHTUNG

Bei der Eichung in z-Richtung vermessen wir die Höhe der atomaren Stufen, indem wir die Topographieaufnahmen der beiden Proben genauer unter die Lupe nehmen. Um die Stufen zu finden, scannen wir zunächst die Probe grob ab, typischerweise Flächen mit etwa 40000  $nm^2$ , und zoomen dann entsprechend heran, um genauere Ergebnisse zu bekommen.

## 2.2.2. Goldprobe

Um die Höhe einer atomaren Stufe der Goldprobe zu bestimmen, suchen wir zwei Terassen und legen ein Höhenprofil aus der Raw-Data an. Aus diesem Höhenprofil können wir mit Hilfe des Programms NanoSurf den Abstand der beiden Terassen bzw. Stufen bestimmen.

TABLE 1

Messung	Abstand $\delta_m[pm]$	Eichfaktor $\chi_{AU}$
$\begin{array}{c}1\\2\\3\\4\\5\\6\end{array}$	$\begin{array}{c} 243(016)\\ 258(016)\\ 245(016)\\ 268(016)\\ 241(016)\\ 239(016)\end{array}$	$\begin{array}{c} 0.97(06)\\ 0.91(06)\\ 0.96(07)\\ 0.89(06)\\ 0.98(07)\\ 0.99(07)\end{array}$

NOTE. — Messungen der Terassenhöhen bzw. monoatomarer Schichten bei der Goldprobe

TABLE 2  $\,$ 

Messung	Abstand $\delta_m[pm]$	Eichfaktor $\chi$
$\begin{array}{c}1\\2\\3\\4\\5\\\end{array}$	$\begin{array}{r} 327(032)\\ 347(032)\\ 338(032)\\ 356(032)\\ 328(032)\\ 328(032)\\ 328(032)\\ 328(032)\\ 328(032)\\ 328(032)\\ 328(032)\\ 338(032)\\$	$\begin{array}{c} 1.02(11) \\ 0.96(10) \\ 0.99(10) \\ 0.94(09) \\ 1.02(11) \\ 1.01(11) \end{array}$
6	331(032)	1.01(11)

Note. — Messungen der Terassenhöhen bzw. monoatomarer Schichten bei der Graphitprobe

Fig. 22 zeigt den ausgewählten und bereits herangezoomten Bereich der Goldprobe an. Wir haben uns für die beiden größeren Terassen in der rechten unteren Bildhälfte entschieden und das Höhenprofil – welches durch das schwarze Dreieck am rechten Bildrand gekennzeichnet ist – von NanoSurf erstellen lassen. Dieses ist in Fig. 23 zu sehen, der ermittelte Abstand der Terassen beträgt  $\delta_m = 243(016) \ pm$ . Ein Pixel entspricht auf der Darstellung etwa 4 pm, die Stufen können wir mit einer Genauigkeit von ca. 4 px anwählen, daher der Fehler von  $\pm 16 \ pm$ .

Wir haben die Messung an sechs verschiedenen Stellen wiederholt (siehe TABLE 1), um ein genaueres Ergebnis zu erhalten. Als Eichfaktor berechnen wir

$$\chi_{AU} = \frac{\delta_l}{\delta_m}.$$

Der Literaturwert für die Dicke einer monoatomaren Goldschicht beträgt  $\delta_l = 235.5 \ pm$ , wir liegen also mit unserer Messung sogar gut im Fehlerbereich und können davon ausgehen, dass wir tatsächlich eine monoatomare Schicht vermessen haben.

Der Eichfaktor für die z-Richtung, ermittelt aus der Goldprobe, beträgt also

$$\chi_{AU} = 0.95(07)$$

## 2.2.3. Graphitprobe

Analog gingen wir bei der Graphitprobe vor. Zunächst grob einen Bereich auswählen, dann heranzoomen und die Schichtdicke mit der bereits erwähnten Methode vermessen. Wir haben bei den Scans diesmal einen Bereich von 29.6  $nm \times 29.6 nm$  vorliegen, weshalb wir den Ablesefehler von auf 32 pm schätzen.



FIG. 24.— Topographie-Scan der Graphitprobe. Der Scan zeigt einen Ausschnitt von 29.6  $nm \times 29.6 nm$ . Man sieht deutlich die zwei Terassen deren Kante quer – von oben rechts nach unten links – durch das Bild geht. Das schwarze Dreieck auf der rechten Seite deutet die horizontale Linie an, durch die wir vom Programm NanoSurf ein Höhenprofil aus der Raw-Data erstellen lassen.



FIG. 25.— Der Graph zeigt das Höhenprofil der in Fig. 24 vermessenen Terassenhöhe. Der kürzeste Abstand der beiden schrägliegenden parallelen und gestrichelten Linien beträgt  $\delta_m = 327(016) \ pm$ 

Fig. 24 zeigt eine der vermessenen Stufen und Fig. 25 das Höhenprofil der vom schwarzen Dreieck in Fig. 24 angedeuteten Stelle. Auch hier haben wir die Messung sechsmal wiederholt und die Werte in TABLE 2 aufgeführt. Die dicke einer monoatomaren Graphitschicht laut Literatur beträgt  $\delta_l = 334.8 \ pm$ .

Bei unseren Messungen lagen wir auch bei Graphit sehr gut im Fehlerbereich und bekommen eine Schichtdicke von  $\delta_m = 338(032) \ pm$  heraus, haben also mit Sicherheit erneut nur eine atomare Schicht vermessen.

Der aus der Graphit<br/>probe ermittelte Eichfaktor $\chi_{Graphit}$  beträgt also

$$\chi_{Graphit} = 0.99(11)$$

wir haben also scheinbar eine geringere Abweichung als bei der Vermessung der Goldprobe.

## ZUSAMMENFASSUNG DER MESSERGEBNISSE

Bei der Vermessung der Stufenhöhen haben wir zu jeder einzelnen Messung einen Fehler angegeben, um bei der Bestimmung des Eichfaktors  $\chi$  die gewonnen Ergebnisse aus beiden Proben zusammenführen zu können.

Wir gewichten nun die Ergebnisse für die beiden Eichfaktoren  $\chi_{AU}$  und  $\chi_{Graphit}$  mit ihrer Genauigkeit und erhalten

$$\chi = \frac{\frac{1}{0.07} \cdot 0.95 + \frac{1}{0.11} \cdot 0.99}{\left(\frac{1}{0.07}\right) + \left(\frac{1}{0.11}\right)} = 0.966$$

Den Fehler berechnen wir mittels Fehlerfortpflanzung und bekommen

$$\chi_{Fehler} = \frac{\sqrt{\left(\frac{1}{0.07}\right)^2 \cdot 0.07^2 + \left(\frac{1}{0.11}\right)^2 \cdot 0.11^2}}{\left(\frac{1}{0.07}\right) + \left(\frac{1}{0.11}\right)} = 0.060$$

heraus.

## WEITERE GEDANKEN ZUR GENAUIGKEIT

Wir haben einen wichtigen Aspekt noch nicht erwähnt, nämlich dass die Stufen im Allgemeinen eine Neigung besitzen, weshalb wir eigentlich noch einen Neigungswinkel-Eichfaktor mit in die Berechnung aufnehmen müssten. Wir gehen jedoch von kleinen Winkeln aus, weswegen wir in der Größenordnung mit wenigen tausendstel  $\mathring{A}$  zu tun haben.

# 2.3. Bestimmung der Austrittsarbeiten mittels I(z)-Kennlinien

Bei diesem Vorgang nehmen wir I(z)-Kennlinien auf, indem wir die Spitze bei fester x- und y-Koordinate und einer festen Spannung  $U_{BIAS}$  an die Probe nähern und wieder entfernen. Bei Graphit haben wir eine Atom angenähert, bei Gold suchten wir eine Terasse und setzten den Punkt auf ihre freie Fläche. Fig. 26 zeigt die beiden ausgewählten Annäherungspunkte.

Es Gilt 
$$I \sim T \sim e^{-2\kappa z}$$
 mit  
 $\kappa = \frac{\sqrt{2m(V-E)}}{\hbar}$ , und  $V = \frac{\phi_{Au} + \phi_{Spitze} - U_{BIAS}}{2}$ 

Bei unserer Datenanalyse gehen wir zunächst von den Rohdaten aus und werden im Nachhinein mit folgender Formel eichen:

$$e^{-2\kappa z} = e^{-2\kappa\chi z_m}.$$

#### 2.3.1. Strom-Abstandsmessungen

Wir haben bei unserem Versuch I(z)-Kennlinien aufgenommen, woraus wir die Austrittsarbeiten für Graphit und Gold berechnen können. Hierzu verwenden wir volgende Proportionalität:

$$\ln(I(z)) \propto 2\kappa z \chi$$

 $\kappa$  können wir auch wie folgt berechnen:

$$\kappa = \frac{dI(z)}{dz} \frac{1}{2\chi}$$



FIG. 26.— Annäherungspunkte bei der I(z)-Spektroskopie. Das obere Bild zeigt den ausgewählten Bereich der Goldprobe, das untere den der Graphitprobe. Die roten Quadrate, sowie die Achsenabschnittspunkte  $X^*$  und  $Y^*$  kennzeichnen den jeweiligen Annäherunspunkt.

Die Angelegte Spannung ist demnach zu vernachlässigen und die Austrittsarbeit für Spitze und Probe sind in etwa gleich ( $\phi_{Probe} \approx \phi_{Spitze}$ ). Wir berechnen also

$$\phi_{Probe} = \frac{(\kappa\hbar)^2}{2m_e} = \left(\frac{dI(z)}{dz}\right)^2 \cdot \frac{\hbar^2}{8\chi^2 m_e}$$

Zur Analyse nehmen wir die Messdaten in der Nähe der Probenfläche, da die Steigung dort nahezu konstant ist. Fig. 27 zeigt die I(z)-Kennlinie von Gold und Fig. 28 die von Graphit.

Bei der linearen Regression wählen wir für Gold zunächst den Bereich von -0.4 nm bis 0.6 nm. Für  $\frac{dI(z)}{dz}$  erhalten wir nach dem Fit einen Wert von 7.86(14) nm mit einer Varianz von 0.036, also relativ genau.



FIG. 27.— I(z)-Kennlinie von Gold



FIG. 28.— I(z)-Kennlinie von Graphit

Für Graphit gehen wir analog vor, wählen den Bereich von 0.5 nm bis 1.4 nm und bekommen für  $\frac{dI(z)}{dz}$  einen Wert von 2.50(12) nm mit einer sogar noch geringen Varianz – im Vergleich zu Gold – von 0.0009.

Die beiden Werte eingesetzt in die obige Gleichung liefert uns schließlich folgende Ergebnisse:

$$\phi_{Graphit} = 0.10 \ eV$$
 ,  $\phi_{Au} = 1.14 \ eV$ .

Wir liegen zwar von der Größenordnung her im Bereich der Literaturwerte, die Näherungen die wir gemacht haben verursachen jedoch Fehler. Auffällig ist, dass der Wert  $\phi_{Graphit}$  im Gegensatz zu  $\phi_{Au}$  wesentlich stärker (etwa Faktor 50) vom Literaturwert abweicht. Vermutlich liegt das an der unterschiedlichen Struktur der beiden Proben. Graphit ist bekanntlich ein Kristall und ist im Vergleich zu Gold wesentlich "instabiler". Graphit besteht – wie bereits erwähnt – aus Schichten, die als 2D-Ebenen betrachtet werden können. Je nach Orientierung dieser Plättchen, können die freien Elektronen mehr oder weniger die Spitze beeinflussen, zu mindest leichter als bei Gold, denn dieses ist ein "echter" 3D–Festkörper.

Topography - Scan backward

FIG. 29.— Die "Kornstruktur" der Goldprobe in einem Bereich von 200 $nm\times200$  nm. Einige der Körner wurden vermessen um die durchschnittliche Größe zu berechnen.

#### 2.4. Morphologie der Goldprobe

Da wir nur eine Goldprobe hatten, können wir in unserer Auswertung nicht auf die Unterschiede zwischen einer Raumtemperatur- und einer Hochtemperatur-Goldprobe eingehen.

Fig. 29 zeigt die ausgewählte Stelle der Goldprobe, an der wir die Körner vermessen haben. Wir haben den oberen Teil des Scans bevorzugt, da im unteren Teil das Wegdriften der Probe das Bild zu sehr verzerrt und nur schlechte Messungen ermöglicht.

Der ausgewählte Scan ist 200  $nm \times 200$  nm groß, und enthält "256 · 265 px''. Ein Pixel entspricht also einer Länge von  $\approx 1$  nm, bei einer Ungenauigkeit von geschätzten 3 px haben wir also einen Ablesefehler von  $\pm 6$  nm da jeweils der Anfangs- und Endpunkt um 3 pxabweichen kann.

TABLE 3 zeigt die Daten der vermessenen Goldkörner. Wir bekommen eine mittlere Körnergröße von 37.6 nm bei einer Varianz von 17.6 und einer Standardabweichung von 16.7. Die Messergebnisse sind also ziemlich ungenau und auch die Eichung hat einen unbedeutenden Effekt, weswegen wir hier auf sie verzichten. Für den Vergleich mit der Körnergröße einer Hochtemperatur-Goldprobe wären die Daten jedoch vermutlich akzeptabel gewesen.

## VERKIPPUNKGSWINKEL DER KÖRNER

NanoSurf besitzt einen Modus, in dem man Winkeln messen kann, ähnlich wie bei der Distanz- oder Stufenhöhenbestimmung. Hierzu betrachten wir einen herangezoomten Bereich von 89.1  $nm \times 89.1 nm$  (vgl. Fig. 30). Das schwarze Dreieck in Fig. 30 deutet die horizontale Linie an, zu der wir von NanoSurf ein Höhenprofil – welches in Fig. 31 zu sehen ist – erstellen ließen.

Die Winkelmessung haben wir nur einmal ausgeführt,

TABLE 3

Messung	Korndurchmesser [nm	1]
1	19(06)	
2	26(06)	
3	38(06)	
4	38(06)	
5	29(06)	
6	33(06)	
7	84(06)	
8	42(06)	
9	33(06)	
10	34(06)	

NOTE. — Durchmesser von 10 zufällig ausgewählten Körner der in Fig. 29 gezeigten Goldprobe. Der mittlere Korndurchmesser beträgt 37.6 nm mit einer Varianz von 17.6 und einer Standardabweichung von 16.7.





FIG. 30.— Scan der zur Verkippungsmessung verwendeten Stelle der Goldprobe.

da wir bei unseren Aufnahmen keine anderen Stellen gefunden haben, die sich für eine solche Messung eignen würden. Dies könnte vermutlich daran liegen, dass wir die Goldprobe nicht optimal vorbereiten konnten.

Der in Fig. 31 gemessene Winkel beträgt 6.9° wobei der Fehler im Vergleich zur Messung äußerst groß auffällt. Wir wenden noch unsere Eichfaktoren an: zwischen dem gemessenen Winkel  $\alpha_m$  und dem tatsächlichem Winkel  $\alpha$  besteht folgender Zusammenhang:

$$\tan \alpha_m = \frac{\chi}{\xi} \cdot \tan \alpha$$

wonach wir

$$\alpha = \tan^{-1}\left(\frac{\xi}{\chi} \cdot \tan \alpha_m\right)$$

erhalten. Damit bekommen wir für den tatsächlichen Winkel $\alpha$ einen Wert von 7.1°.



FIG. 31.— Winkelmessung der in Fig. 30 dargestellten Körner im Programm NanoSurf.



FIG. 32.— Korrugation: CC-Mode-Aufnahme der Graphitprobe.



FIG. 33.— Korrugation: CH-Mode-Aufnahme der Graphitprobe.

## 2.5. Korrugation

Man bezeichnet als Korrugation die scheinbare Welligkeit der Oberfläche auf atomarer Längenskala. Beim Rastertunnelmikroskop ist diese eine Mischung aus lokaler Zustandsdichte und der Form der Atome. Wir untersuchen die Korrugation bei einer CC-Mode- und einer CH-Mode-Aufnahme. Fig. 32 zeigt eine Aufnahme der Graphitprobe im CC-Mode. Es wurden 9 Maxima und 8 Minima vermessen und gemittelt. Wir erhalten eine mittlere maximale  $(\overline{\delta z_{max}})$  und mittlere minimale  $\overline{\delta z_{min}}$ Amplitude die Werte:

$$\overline{\delta z_{max}} = 76(06) \ pm$$
 und  $\overline{\delta z_{min}} = -109(006) \ pm.$ 

Die Standardabweichung und Varianz betragen bei  $\overline{\delta z_{max}}$  46.4 bzw. 43.8 und bei  $\overline{\delta z_{min}}$  31.1 und 29.1, die Ergebnisse streuen also sehr.

Ebenso haben wir in der CH-Mode-Aufnahme der Graphitprobe die Tunnelstromamplituden vermessen, jeweils 5 Maxima und Minima. Fig. 33 zeigt den entsprechenden Graphen. Hier errechneten wir für  $\overline{\delta I_{max}}$ einen mittleren Wert von 1.32(02) nA und für  $\overline{\delta I_{min}}$ einen Wert von 0.83(02). Bei dieser Messung haben wir wesentlich geringere Standardabweichungen und Varianzen. Für  $\overline{\delta I_{max}}$  betragen Standardabweichung und Varianz 0.057 bzw. 0.051, und für  $\overline{\delta I_{min}}$  0.022 und 0.190.

Um die beiden Werte direkt vergleichen zu können, muss man die Einheit der einen Messung, an die der anderen umrechnen. Es gilt bekanntlich

$$I(z) = I_0(x, y)e^{-2\kappa z}$$

wobe<br/>i $I_0$ vom Ort – präziser: von der Zustandsdichte – abhängt <br/>. Für den CC-Mode gilt also:

$$e^{-\kappa(z_{max}-z_{min})} = \frac{I_0(x_{min}, y_{min})}{I_0(x_{max}, y_{max})}$$

und für den CH-Mode:

$$\frac{I_{max}}{I_{min}} = \frac{I_0(x_{max}, y_{max})}{I_0(x_{min}, y_{min})}$$

wonach die Zustandsdichte nur noch von der Probe und nicht von der Messmethode abhängt. Jetzt können wir die beiden Formeln zusammenführen und erhalten:

$$z_{max} - z_{min} = \frac{1}{2\kappa} \ln\left(\frac{I_{max}}{I_{min}}\right)$$

Für  $\Delta z$  bekommen wir nun einen Wert von 0.614 pm heraus.

Die Korrugationen der beiden Aufnahmen unterscheiden sich etwa um den Faktor 4. Dies liegt unter anderem daran, dass beim CC-Mode die Messergebnisse stark von den Bewegungen der Piezoelemente abhängen.

#### 2.6. I(U)-Spektroskopie

Wenn wir bei unserer Spitze von einer strukturlosen Zustandsdichte  $\rho_{Spitze}$  ausgehen, dann gilt nach BAR-DEEN folgender Zusammenhang:

$$\rho_{Probe}(E_F - e \cdot U_{bias}) \sim \frac{dI}{dU}$$

wobei  $E_F$  die Fermienergie bezeichnet. Wir können also aus der Steigung der I(U)-Kennlinie die Volumen- und Oberflächenzustandsdichten in Abhängigkeit der Energie bestimmen. Bei Temperaturen > 0 verschwinden die Fermikanten und die Energieauflösung nimmt ab. Aufgrund der Tatsache, dass wir bei Raumtemperaturen gearbeitet haben, gehen wir von Abweichungen vom in der Vorbereitungspräsentation gezeigten Verlauf.



FIG. 34.— Drei Einzelmessungen der  ${\cal I}(U)\mbox{-}{\rm Kennlinie}$  der Graphitprobe.



FIG. 35.— Drei Messungen der  ${\cal I}(U)\mbox{-}{\rm Kennlinie}$  der Graphit<br/>probe inklusive Fitgerade.

## 2.6.1. I(U)-Kennlinie von Graphit

Fig. 34 zeigt drei I(U)-Messungen der Graphitprobe. Diese werden in Fig. 35 zusammengeführt und mit Hilfe eines Polynoms gefittet. Wir verwendeten hierbei ein Polynom 3. Grades:

$$f(x) = ax^3 + bx^2 + cx + d$$

und erhielten folgende Parameter

$$\begin{split} a &= +1.07982e - 09 + / -1.267e - 11(1.173\%) \\ b &= -9.60905e - 11 + / -9.645e - 12(10.04\%) \\ c &= +1.32212e - 10 + / -1.866e - 11(14.11\%) \\ d &= -2.56703e - 10 + / -9.695e - 12(3.777\%) \end{split}$$

Mit der Ableitung dieser Funktion können wir nun die Fermienergie bestimmen, die wegen der fehlerhaften Eichung des Messapparates verschoben sein kann. In der Theorie sollte der Graph wie in Fig. 36 aussehen. Durch Ableitung (vgl. Fig. 37) der Fitfunktion finden wir heraus, dass die Fermienergie bei etwa -0.05 V liegt. Der berechnete Verlauf entspricht qualitativ dem theoretischem und weist auch die leichte Verschiebung des DOS-Minimums auf.



FIG. 36.— Theoretische Zustandsdichte von Graphit. Die gestrichelte Linie deutet das Ferminiveau an. Die Zustandsdichte steigt parabelförmig an, sobald man sich vom Ferminiveau entfernt. Weiterhin ist es zu bemerken, dass die Zustandsdichte nicht auf 0 sinkt, sondern in der Nähe der Fermienergie ein Minimum annimmt.



FIG. 37.— Ableitung der in Fig. 35 dargestellten Fitgerade.

## 2.6.2. I(U)-Kennlinie von Gold

Wir betrachten zunächst den theoretischen Verlauf der I(U)-Kennlinie von Gold in Fig. 38 und stellen fest, dass diese sich in drei Bereiche unterschiedlicher Steigung zerlegen lässt. Der erste Bereich bis  $-800 \ mV$  steigt am steilsten, zwischen  $-800 \ mV$  und  $-500 \ mV$  haben wir die geringste Steigung und den dritten Bereich oberhalb von  $-500 \ mV$ .

Die Messdaten für die Goldprobe haben wir in Fig. 39 zusammengefasst.

Fig. 40 zeigt die Fitgeraden für die drei genannten Be-



FIG. 38.— Theoretischer Verlauf der I(U)-Kennlinie von Gold. Man bemerke die in drei Bereiche jeweils unterschiedlicher Steigung.



FIG. 39.— Drei Einzelmessungen der  ${\cal I}(U)\mbox{-}{\rm Kennlinie}$  der Goldprobe.

[1]Stöcker, Taschenbuch der Physik, Verlag Harri Deutsch [2]H. Ibach / H. Lüth, Festkörperphysik



FIG. 40.— Drei Messungen der  ${\cal I}(U)\mbox{-}{\rm Kennlinie}$  der Goldprobe inklusive Fitgerade.

reiche. Die Steigung der Kurven sind jeweils:

$$\begin{split} m1 &= 7.20343e - 08 + / - 3.787e - 08(52.57\%) \\ m2 &= 6.35211e - 08 + / - 1.58e - 08(24.88\%) \\ m3 &= 5.3524e - 08 + / - 1.788e - 09(3.34\%) \end{split}$$

Qualitativ existiert eine gewisse Übereinstimmung mit der Theorie. Die Steigung im zweiten Bereich sollte jedoch am geringsten sein, was bei uns nicht der Fall ist. Dieses Ergebnis ist jedoch auch nur möglich gewesen, weil wir im Voraus schon wussten was zu erwarten ist. Die Lage der Bereichsgrenzen ist aus unseren Daten nicht ersichtlich: wir können weder 3 Bereiche differenzieren, noch das Vorhandensein von linearen Zusammenhängen erkennen.

# REFERENCES