

# Bericht zum Versuch

## Rastertunnelmikroskopie

Anton Haase, Michael Goerz

23. Oktober 2006

FREIE UNIVERSITÄT BERLIN  
Fortgeschrittenenpraktikum Teil A  
Tutor: K. Franke

### Inhalt

<b>1 Einführung</b>	<b>2</b>
1.1 Tunneleffekt . . . . .	2
1.2 Piezoelektrischer Effekt . . . . .	3
1.3 Technische Grundlagen . . . . .	4
1.4 Atomare Struktur von Graphit . . . . .	5
<b>2 Fragestellung</b>	<b>5</b>
<b>3 Versuchsaufbau und Durchführung</b>	<b>6</b>
<b>4 Auswertung</b>	<b>7</b>
4.1 Wirkung der Parameter . . . . .	7
4.2 Atomare Struktur auf glatter Oberfläche . . . . .	7
4.3 Höhen und Abstände . . . . .	7
4.4 Fouriertransformation . . . . .	10
4.5 Mesoskopische Strukturen (Stufen und Gräben) . . . . .	10
4.6 Fehlerbetrachtung . . . . .	11
<b>5 Zusammenfassung</b>	<b>11</b>

# 1 Einführung

Das Rastertunnelmikroskop wurde 1982 von G. Binnig und H. Rohrer erfunden [1], wofür sie im Jahre 1986 den Nobelpreis erhielten. Es handelt sich um ein nicht-optisches Verfahren zur computerunterstützten bildlichen Darstellung atomarer Strukturen unter Ausnutzung des quantenmechanischen Tunneleffekts.

## 1.1 Tunneleffekt

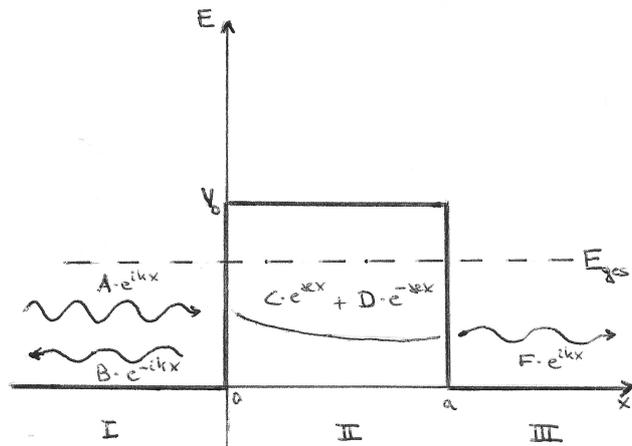


Abb. 1: Tunneleffekt

Der quantenmechanische Tunneleffekt wird im einfachsten Modell beschrieben als eine rechteckige Potentialbarriere (siehe Abb. 1). Die Wellenfunktion auf der linken Seite der Barriere mit  $V = 0$  ist die Überlagerung einer einfallenden und einer reflektierten Wellenfunktion,  $A \cdot e^{ikx} + B \cdot e^{-ikx}$ . Hinter dem Potentialberg ist eine auslaufende Welle geringerer Amplitude  $F \cdot e^{ikx}$  anzusetzen. Innerhalb der Barriere ergibt die Wellenfunktion einen exponentiellen Abfall, wovon man sich leicht durch Einsetzen in die Schrödingergleichung überzeugen kann. Der Ansatz lautet:

$$\Psi_{II} = C \cdot e^{\kappa x} + D \cdot e^{-\kappa x} \quad (1)$$

Dies in die Schrödingergleichung

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V \cdot \Psi = E \cdot \Psi \quad (2)$$

eingesetzt ergibt sofort

$$\kappa^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (V - E) \quad (3)$$

Nach einer genauen Berechnung der Amplituden kann man sich aufgrund der Stetigkeitsbedingungen vergewissern, dass es sich tatsächlich um einen exponentiellen *Abfall* handelt. Eine genaue Rechnung findet sich bei [4, S. 63]

Die Stärke des Tunnelstroms ist dann proportional zu der Tunnelwahrscheinlichkeit eines Elektrons, und fällt damit auch exponentiell abhängig von der Breite der Potentialbarriere ab.

Das kastenförmige Modell lässt sich qualitativ auch für das Rastertunnelmikroskop heranziehen. Die Anpassung an das tatsächliche Potential, welches aus einer Überlagerung der Elektronen-Wellenfunktionen am Fermi-niveau der Spitze und der Oberfläche der Probe entsteht, geschieht über die Variation der Potentialberg-Breite. Neben dem tatsächlichen Abstand zwischen der Spitze des Rastertunnelmikroskops und der Probe verringert auch der Überlapp der Wellenfunktionen die Breite und Höhe. Tatsächlich misst man mit dem Rastertunnelmikroskop aber die Elektronenzustandsdichte an der Oberfläche der Probe, diese passt sich aber der Topographie an.

Desweiteren ist es beim STM so, dass das Potential auf der Oberfläche der Probe geringer ist als an der Spitze, damit der Tunneleffekt nur in *eine* Richtung auftritt, und der Strom in die vorgegebene Richtung fließt (siehe Abb. 2).

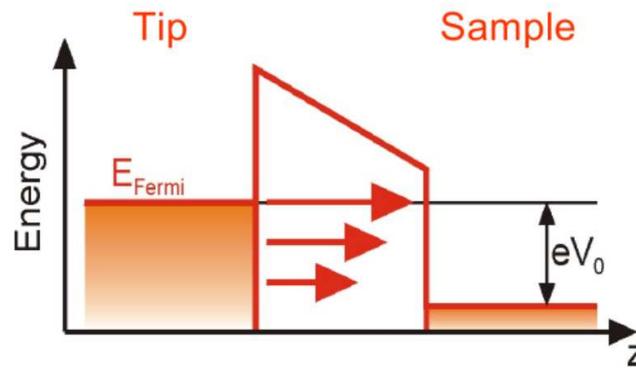


Abb. 2: Potential am STM (aus [2])

Quantitativ lässt sich dieses einfache Modell nicht mehr benutzen. Eine genaue theoretische Analyse (siehe [5]) kommt auf eine Formel, die von den Dichten der Elektronen am Fermi-niveau von sowohl Rastertunnelmikroskop-Spitze als auch Probenoberfläche, und einer durch ein Matrixelement beschriebene Übergangswahrscheinlichkeit zwischen den beiden Wellenfunktionen abhängt:

$$I = \frac{2\pi e}{\hbar} \sum_{\mu, \nu} f(E_{\mu}) [1 - f(E_{\nu} - eV)] \delta(E_{\mu} - E_{\nu}) |M_{\mu\nu}|^2 \quad (4)$$

Im eindimensionalen Fall lässt sich daraus aber wieder eine einfache exponentielle Abhängigkeit

$$I \propto U \cdot k \cdot e^{-kd} \quad (5)$$

herleiten.

## 1.2 Piezoelektrischer Effekt

Bei bestimmten Kristallen sowie Keramiken kann durch mechanische Deformation eine Spannung zwischen den beiden gegenüberliegenden Druckpunkten nach-

gewiesen werden. Der Grund dafür liegt in der atomaren Struktur des jeweiligen Stoffes (siehe Abb. 3). Ein wesentlicher Nutzen besteht neben der Erzeugung von Spannungen auch in der Umkehrung des Effekts. Dabei kommt es zu Verformungen auf atomarer Skala, wenn eine Spannung an den Piezokristall angelegt wird. Mit Hilfe dieses Mechanismus lässt sich die Spitze des STM sehr präzise steuern.

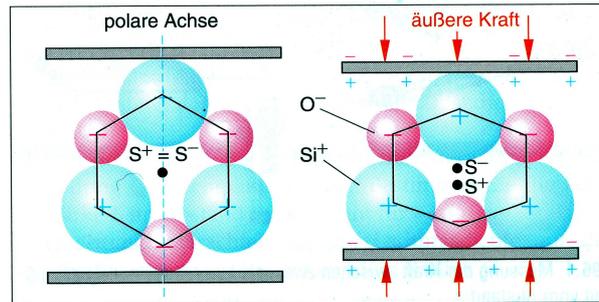


Abb. 3: Veranschaulichung des Piezoelektrischen Effekts (aus [3])

### 1.3 Technische Grundlagen

Das Rastertunnelmikroskop besteht im Wesentlichen aus einer nach unten weisenden extrem dünnen Metallspitze (im Idealfall nur ein Atom am Spitzenende), die an einer bewegbaren Aufhängung montiert ist. Die Veränderung der Spitzenposition kann in alle drei Raumrichtungen sowohl von Hand, als auch piezoelektrisch erfolgen. Letzteres ermöglicht eine präzise Variation der Position auf einer atomaren Skala. Die zu untersuchende Probe, deren Oberfläche den elektrischen Strom leiten muss, wird unterhalb der Spitze platziert. Wird nun eine Potentialdifferenz von einigen Millivolt zwischen Spitze und Probe angelegt und beide genügend dicht aneinandergebracht, so ist auf Grund des oben erläuterten quantenmechanischen Tunneleffekts ab einem Abstand  $< 1$  nm ein Strom  $I_t$  messbar (Abb. 4). Die Änderung des Tunnelstroms hängt dabei exponentiell von dem Abstand zwischen Spitze und Oberfläche ab (siehe Abb. 5). So führt beispielsweise eine Abstandsänderung von 1 Å bereits zu einer Änderung der Größenordnung des Tunnelstroms.

Um aus diesem Prinzip ein Bild der Probe zu gewinnen, ist es erforderlich die gesamte Oberfläche abzutasten. Die X-Y-Position der Spitze wird unter Verwendung der piezoelektrischen Steuerelemente einem Raster folgend verändert und durch einen Computer protokolliert. Dabei wird der Tunnelstrom durch Anpassung des Abstandes von Spitze und Probenoberfläche (Z-Richtung) stets konstant gehalten. Aus den X-Y-Koordinatenpaaren und den Werten für die Spannung an dem Piezoelement der Z-Richtung für jedes Koordinatenpaar kann der Computer dann ein Bild der Oberflächentopographie (und der Elektronendichte) der Probe errechnen.

Die hohe Präzision der Apparatur erfordert selbstverständlich auch besondere Umgebungsbedingungen. Der Messkopf muss bestmöglich von jeglicher Erschütterung geschützt werden. Um dies zu erreichen sind Rastertunnelmi-

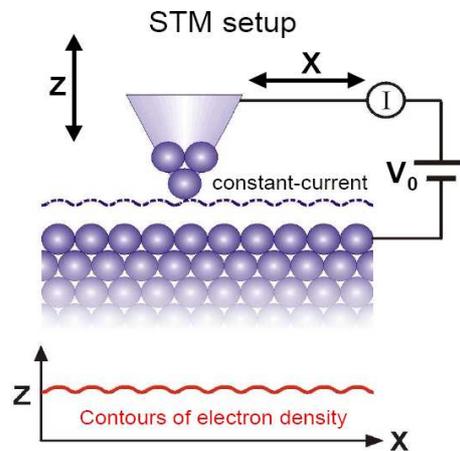


Abb. 4: Prinzip des Rastertunnelmikroskops (aus [2])

roskopie häufig auf speziellen Tischen mit Schwingungsdämpfung aufgebaut. Desweiteren erfordern manche Oberflächen ein Ultrahochvakuum, da sie unter Normalbedingungen oxidieren würden.

#### 1.4 Atomare Struktur von Graphit

Graphit liegt in einem hexagonalen Bravaisgitter (hcp) vor. Dabei sind übereinanderliegende Ebenen zueinander versetzt, wie in Abb. 5 links zu sehen. Dies hat gleichzeitig den Effekt, dass der vertikale Abstand der Atome in benachbarten Schichten unterschiedlich ist: Unter bestimmten Atomen sind Atome der darunterliegenden verschobenen Ebene im halben Ebenenabstand  $C/2$  zu finden (linke vertikale Linie in Abb. 5), unter anderen ist das nächste Atom erst wieder im vollen Ebenenabstand  $C$  (zweite vertikale Linie von links) zu finden. Rechts in Abb. 5 sind erstere Atome hervorgehoben. Es ist nun auch leicht verständlich, dass die Elektronendichte bei diesen Atomen höher ist, sie werden im STM eine höhere Sichtbarkeit haben. Es ist zu erwarten, dass im STM-Bild nicht die direkte hexagonale Struktur des Graphits sichtbar ist, sondern dass größere grau hervorgehobene Sechsecke.

Der planare Abstand zweier Graphitatomatome ist mit  $1.42 \text{ \AA}$  angegeben. Aus einfachen trigonometrischen Überlegungen kann man ersehen, dass die Kantenlänge des größeren Sechsecks  $2.46 \text{ \AA}$  betragen muss. Der halbe Ebenenabstand  $C/2$  ist mit  $3.35 \text{ \AA}$  gegeben.

## 2 Fragestellung

Ziel des Versuchs ist die Untersuchung verschiedener Strukturen auf einer Graphitoberfläche, sowie das Vertrautwerden mit der Funktionsweise und den Einstellmöglichkeiten eines Rastertunnelmikroskops, insbesondere den Parametern „Integral Gain“ und „Proportional Gain“.

Im ersten Teil des Experiments war ein glatter Bereich der Oberfläche zu untersuchen, um die atomare Struktur des Graphits darzustellen. Anhand dieser Darstellung wurden die Abmessungen und Höhenunterschiede der Oberfläche

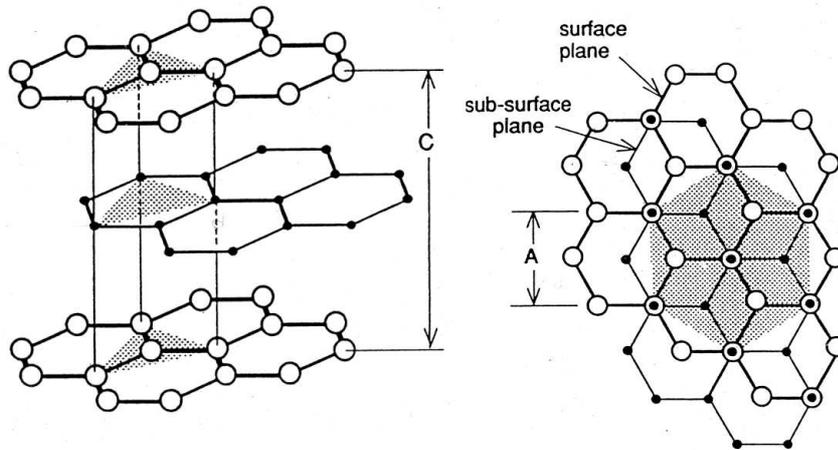


Abb. 5: Atomare Struktur von Graphit

quantifiziert, sowie die Symmetrien analysiert und mittels einer Fouriertransformation Strukturinformationen gewonnen.

Im zweiten Teil war das Ziel Stufen oder Gräben zu finden, deren Höhe auszumessen und mit dem Ebenenabstand von Graphit zu vergleichen.

### 3 Versuchsaufbau und Durchführung

Im Experiment haben wir das Rastertunnelmikroskop *NANOSCOPE II* der Firma *Digital Instruments* verwendet. Die Spitze wurde von uns manuell aus einem Platin-Iridium-Draht gefertigt und eingesetzt. Mit Hilfe eines Klebebandes haben wir die obersten Schichten der Graphitprobe entfernt, um optimale Bedingungen für die Messungen zu erhalten.

Das Gerät wurde von einem Computer gesteuert, der die Spitze mit einem Schrittmotor an die Graphitprobe annäherte, bis ein Tunnelstrom detektiert wurde. Parametersteuerung und Bildanalyse erfolgten auf zwei separaten Monitoren. Ergebnisse konnten in Form von Screenshots mit einem Spezialdrucker ausgegeben werden. Sämtliche Abtastvorgänge wurden im constant-current-mode durchgeführt.

Bereits mit der ersten erzeugten Spitze konnten wir erfolgreich atomare Strukturen auflösen, und haben sie daher für alle durchgeführten Messungen verwendet.

Nach Inbetriebnahme der Apparatur haben wir uns mit den verschiedenen Einstellungsmöglichkeiten vertraut gemacht, insbesondere mit der Wirkung von „Proportional Gain“ und „Integral Gain“. Zusätzlich haben wir die Skalierung (z-Range) und die Scanrate variiert.

Im Anschluss haben wir die zur Beantwortung der Fragestellung notwendigen Messungen durchgeführt.

## 4 Auswertung

### 4.1 Wirkung der Parameter

Die Höhe der Spitze über der Oberfläche wurde während des Scanvorgangs ständig angepasst, um einen konstanten Tunnelstrom zu gewährleisten. Es zeigte sich jedoch, dass die Spitze bei scharfen Erhebungen (oder Gräben) nach der Höhenanpassung um die vorgesehene Position (in z-Richtung) oszillierte, wobei jede Schwingung als Änderung der Oberflächentopographie gedeutet wurde.

Der Parameter „Integral Gain“ dient zur Kompensation dieses Effekts. Er kontrolliert die Geschwindigkeit mit der die Spitze auf Änderungen der Oberfläche reagiert. Ein kleiner Wert bedeutet eine träge Reaktion der Spitze und somit eine weitgehende Unterdrückung des oben beschriebenen Effekts. Ein zu geringer Wert führt jedoch auch zu einer Unterdrückung der Oberflächentopographie. Geht man zu höheren Scanraten muss der Spitze eine schnellere Reaktion auf die Veränderungen der Oberfläche gestattet werden, also der Parameter entsprechend nach oben angepasst werden. Zudem war bei der Erhöhung des Parameters eine Vergrößerung des Höhenbereichs (z-Range) erforderlich. Effektiv regelt dieser Parameter den Kontrast des Bildes. Ab einem Wert von ca. 2 waren erste Strukturen erkennbar. Für die Messungen haben wir einen Wert von ca. 10-12 verwendet.

Die Änderung des Parameters „Proportional Gain“ hatte bei unseren Messungen keine sichtbaren Auswirkungen. Bei sehr großen Werten wirkte das Bild körnig und verrauscht.

Eine Variation der Abtastrate (scan rate) ergab, dass Werte zwischen 60 und 80 Hz gut für das Erkennen von Strukturen geeignet sind. Zu niedrige Werte führten zu verwischten Bildern, da die Nadel durch ungenaue Piezosteurelemente und Thermik driftet.

### 4.2 Atomare Struktur auf glatter Oberfläche

Die Untersuchung mit den Parametern

scan rate	=	78.13 Hz
integral gain	=	11.23
proportional gain	=	1.05
scan size	=	2.3 nm
z-range	=	0.56 nm

eines glatten Teils der Graphitoberfläche ergab das in Abb. 6 gezeigte Resultat.

Im nächsten Schritt haben wir das Bild einem Flatten-Filter und einer zweidimensionalen Fouriertransformation unterzogen (siehe unten). Mit dieser Methode war es uns möglich regelmäßige Strukturen zu isolieren und zufällig verteilte Störungen herauszufiltern. Die Abb. 7 zeigt das Ergebnis dieser Manipulation. Die hexagonale Struktur des Graphit ist gut zu erkennen.

### 4.3 Höhen und Abstände

Der horizontal gemessene Atomabstand beträgt

$$d \approx 2.26 \text{ \AA}$$

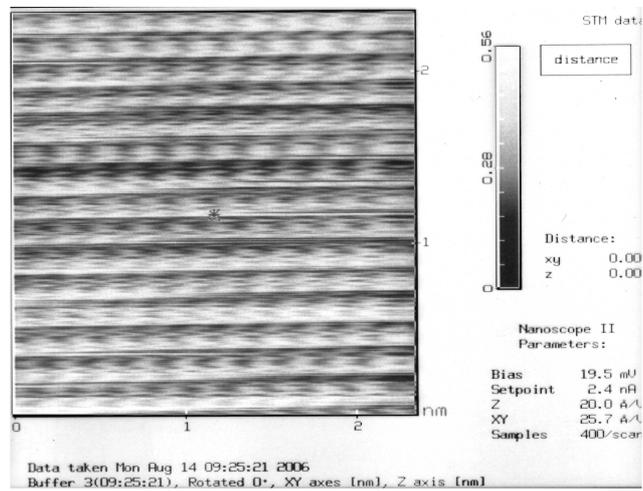


Abb. 6: Direkte Messung einer glatten Oberfläche

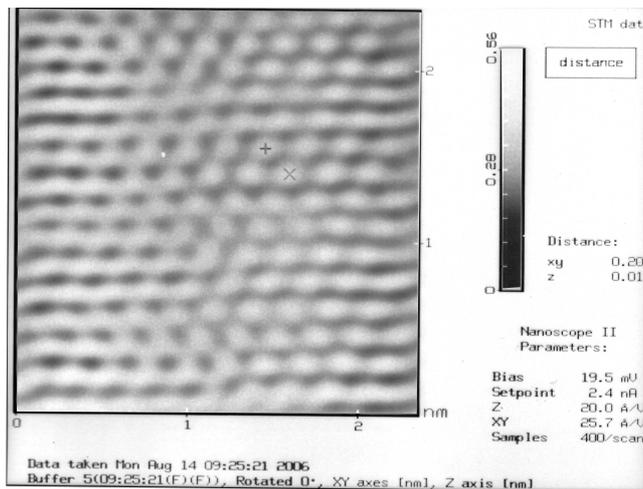


Abb. 7: Fourieroptimierte Darstellung einer glatten Oberfläche

Die diagonale Messung ergibt einen Wert von

$$d \approx 1.76 \text{ \AA}.$$

Allerdings ist der Wert der horizontalen Messung dem der diagonalen Messung vorzuziehen, da, wie in Abb. 6 erkennbar, das Bild in dieser Richtung relativ stark verschmiert ist. Zudem ist auch die Kurve in Abb. 9 im Vergleich zur Kurve in Abb. 8 recht unregelmäßig. Der aus der horizontalen Messung ermittelte Wert ist deutlich näher an dem in Abschnitt 1.4 berechneten Wert von  $2.46 \text{ \AA}$ , als an dem planaren Abstand zweier nächsten Nachbarn von  $1.42 \text{ \AA}$ . Die Erwartung, dass nur jedes zweite Atom der Oberflächenschicht abgebildet wird, wurde also damit bestätigt.

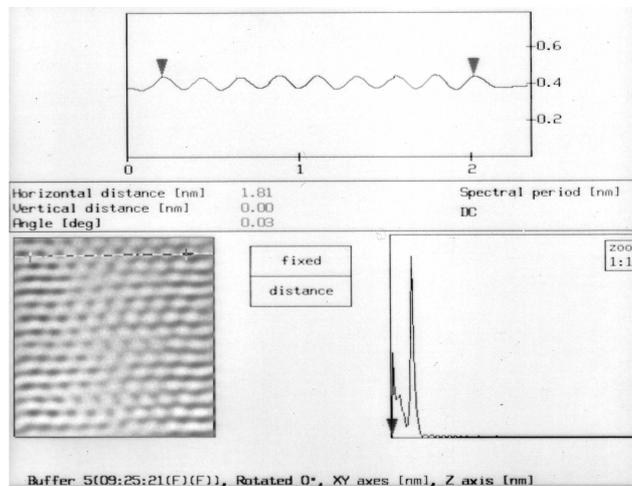


Abb. 8: Horizontale Abstandsmessung

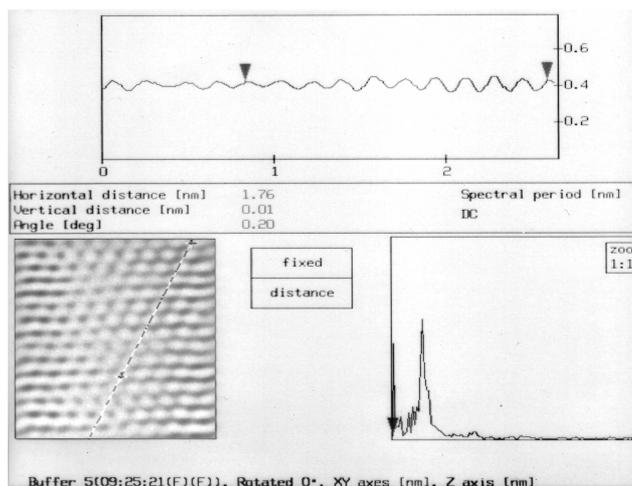


Abb. 9: Diagonale Abstandsmessung

Außer den Abständen der Atome war noch die Höhe zu messen. Wir haben den Wert  $0.7 \text{ \AA}$  abgelesen. Dies entspricht in der Tat genau dem Atomradius von Graphit, auch wenn dieses Ergebnis wohl eher zufällig zustande gekommen ist.

#### 4.4 Fouriertransformation

Abb. 10 zeigt die Fourierspektralansicht mit deren Hilfe Abb. 6 in Abb. 7 überführt wurde. Diese Darstellung bildet ab, welche Vektoren des reziproken Raums besondere Regelmäßigkeiten aufweisen. Die Punkte des reziproken Gitters sind als helle Stellen zu erkennen. Die Symmetrie ergibt sich aus der trivialen Tatsache, dass ein reziproker Vektor gleichermaßen in positiver wie in negativer Richtung angewandt werden kann. Die erkennbaren Rahmen stellen die Selektion für die Rücktransformation dar. Auf dem Bild sind zudem gut die höheren Ordnungen erkennbar.

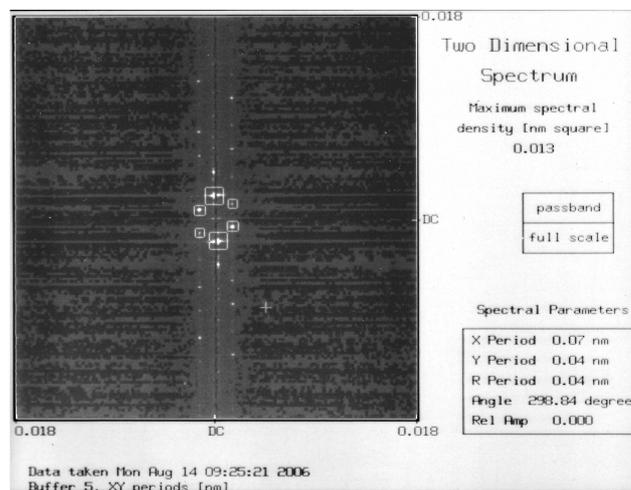


Abb. 10: Fouriertransformation

#### 4.5 Mesoskopische Strukturen (Stufen und Gräben)

Das finden von Stufen oder Gräben stellte sich zunächst als problematisch heraus, da die Oberfläche kaum Irregularitäten aufwies. Zudem ist es schwierig, *echte* Gebilde von Störungen zu unterscheiden. Nach einigem Suchen konnten wir dennoch eine passende Struktur ausfindig machen (siehe Abb. 11).

Die gemessene Höhe der Stufe war

$$h \approx 6 \text{ \AA}$$

Dies korrespondiert mit einem vollen Ebenenabstand von  $C = 6.7 \text{ \AA}$ . An dieser Stelle wurden also zwei Atomschichten abgetragen

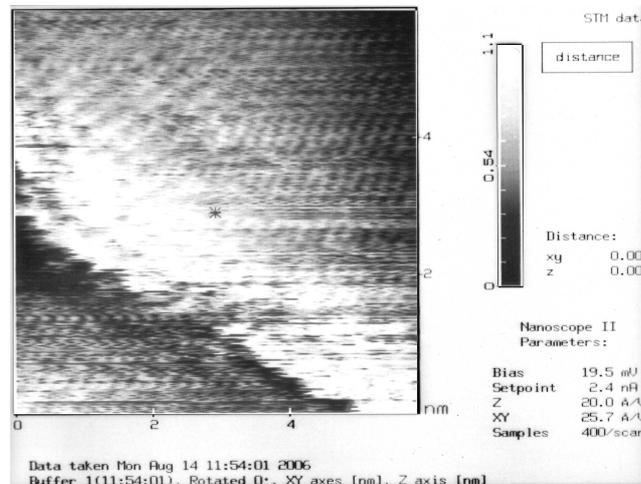


Abb. 11: Stufe in der Graphitoberfläche

## 4.6 Fehlerbetrachtung

Obwohl es uns bei der Durchführung des Experiments gelungen ist atomare Auflösungen zu erreichen, sogar bei großem Scanbereich, stellt der Betrieb eines Rastertunnelmikroskops unter Normalbedingungen eigentlich nur eine Methode zur Strukturanalyse, nicht jedoch zur genauen Bestimmung von Höhendifferenzen oder atomaren Abständen dar. Der gesamte Messvorgang unterlag erheblichen Störungen, wie sie in der Abb. 6 zu sehen sind. Die Erklärung dafür liegt in der schlechten Schwingungsdämpfung der gesamten Apparatur, die lediglich in einem luftgefüllten Reifen bestand, sowie in der handgefertigten Spitze, die sicherlich mehr als nur ein Atom am unteren Ende hatte. Desweiteren kam es durch das verwendete Piezoelement zu Drifteffekten, die für eine zusätzliche Verzerrung sorgten und die Reproduzierbarkeit eines erhaltenen Bildes stark einschränkte (insbesondere bei den Stufen).

Durch die Anwendung verschiedener Filter, insbesondere der Fouriertransformation, ist es uns gelungen das ursprüngliche Ergebnis deutlich zu verbessern (siehe Abb. 7). Selbstverständlich ist mit den Filtermaßnahmen auch immer ein Verlust an Genauigkeit verbunden. Unter Anderem wird bei der Anwendung des Flatten-Filters aus den Messwerten um einen festen Punkt herum ein Mittelwert der Höhe gebildet, so dass beispielsweise ebene Flächen hinter Stufen mit einer Steigung dargestellt werden (siehe Abb. 11). Die Veränderung des oben erläuterten Parameters *Integral Gain* brachte ebenfalls eine Verzerrung der Höhenskala mit sich.

## 5 Zusammenfassung

Die erreichten Resultate unseres Experiments sind unter den oben diskutierten Bedingungen als gut zu bewerten. Wir waren in der Lage die theoretische Erwartung der atomaren Struktur der untersuchten Graphitoberfläche vollständig zu bestätigen. Die erhaltenen Messwerte korrespondieren in allen Fällen mit den

theoretischen Vorhersagen.

## Literatur

- [1] BINNIG, Gerd ; ROHRER, Heinrich: Scanning tunneling microscopy. In: *Helvetica Physica Acta* 55 (1982), S. 726–735
- [2] FÖLSCH, Stefan: *STM-based dI/dV Spectroscopy*. 2006. – URL [http://www.physik.fu-berlin.de/sfb658/tutorial/SS06/Tutorial\\_Foelsch.pdf](http://www.physik.fu-berlin.de/sfb658/tutorial/SS06/Tutorial_Foelsch.pdf)
- [3] GREHN, Joachim (Hrsg.) ; KRAUSE, Joachim (Hrsg.): *Metzler Physik*. Schroedel, 1998
- [4] SCHWABL, Franz: *Quantenmechanik*. 6. Springer, 2005
- [5] TERSOFF, J. ; HARMANN, D. R.: Theory of the scanning tunneling microscope. In: *Physical Review B* 31 (1984), S. 805–813