# Inhaltsverzeichnis

In	Inhaltsverzeichnis			
1	The	oretische Grundlagen	1	
	1.1	Der Tunneleffekt	1	
	1.2	Das Bändermodell	2	
	1.3	Der piezoelektrische Effekt	2	
	1.4	Graphit	3	
<b>2</b>	Versuchsaufbau und Durchführung			
	2.1	Aufbau	3	
	2.2	Durchführung	4	
3	Aus	wertung und Fehleranalyse	5	
	3.1	Untersuchung von Graphit	5	
	3.2	Untersuchung von Gold	7	
	3.3	Untersuchung eines Halbleiters	8	
4	$\mathbf{Disl}$	cussion der Ergebnisse	9	
A	Gra	phen der weiteren eingezeichneten Abstände	11	
в	Test	weise Auswertung des eigentlich konstanten Tunnelstroms	11	
Ał	Abbildungsverzeichnis			
$\mathbf{Li}_{1}$	Literatur			

#### 1 Theoretische Grundlagen

#### 1.1 Der Tunneleffekt

Das grundlegende Phänomen dieses Versuchs ist der Tunneleffekt. In der Quantenmechanik werden Elektronen durch ihre Wellenfunktion  $\Psi(x)$  beschrieben. Das Betragsquadrat der Wellenfunktion kann mit einer Aufenthaltwahscheinlichkeit assoziiert werden. Die Wellenfunktion eines Teilchens muss Lösung der Schrödingergleichung

$$i\hbar\Psi(x,t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x,t)\right)\Psi(x,t)$$
(1)

sein. Löst man die Schrödingergleichung für ein endlich hohes Potential so sieht man, dass die Aufenthaltwahrscheinlichkeit des Elektrons auf der anderen Seite der Potentialbarriere nicht verschwindet. Wie in Abb. 1 zu sehen ist, nimmt die Aufenthaltswahrscheinlichkeit



Abbildung 1: Darstellung des Tunneleffekts am eindimensionalen Beispiel durch eine Potentialbarriere der Höhe  $V_0$ 

in der Potentialbarriere

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & \text{falls } |x| < a \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}$$
(2)

exponentiell ab. Dies folgt aus der Lösung der Schrödingergleichung für eine von links einlaufende Welle unter Verwendung der Stetigkeitsbedingung an die Wellenfunktion  $\Psi(x)$ und ihrer Ableitung. Für den Tunnelstrom, welcher im Versuch gemessen wird, gilt für kleine Spannungen

$$I \propto U \cdot \exp\left(-\sqrt{\frac{2mV}{\hbar}d}\right). \tag{3}$$

Es lässt sich also festellen, dass der Tunnelstom linear von der Spannung U und exponentiell abfallend vom Abstand d abhängt.

In diesem Versuch wird der Tunneleffekt genutzt indem ein extrem spitzer Draht (optimalerweise einatomige Spitze) sehr nah an eine Probe herangefahren wird. Zwischen Probe und Spitze wird eine Spannnung angelegt. Sind sich Spitze und Probe nah genug kann ein Tunnelstrom gemessen werden. Nun kann ein Oberflächenabschnitt in der Art abgerastert werden, dass entweder Tunnelstrom oder Abstand konstant gehalten werden und die Änderung des jeweils anderen zur topographischen Analyse genutzt werden kann.

#### 1.2 Das Bändermodell

Eine der untersuchten Proben ist Molybdänsulfid – ein Halbleitermaterial. Um das Verhalten der Elektronen in Halbleitern zu verstehen nutzt man das Bändermodell. Betrachtet man ein einzelnes Atom so haben die Elektronen ein diskretes Energiespektrum, d. h. die Elektronen können nur diskrete Energien annehmen. Ordnet man nun viele Atome in einer Kette an mit geringem Abstand führt das zu einer Überlappung der äußeren Orbitale, was dazu führt dass die Elektronen wechselwirken. Diese Wechselwirkung führt zu einer Aufspaltung der Energien bis hin zu kontinuierlichen Energiebändern. Um diesen Umstand zu veranschaulichen ist die Anordung der Atome und die erlaubten Energieniveaus in Abb. 2 dargestellt.



Abbildung 2: Veranschaulichung der Energieaufspaltung der Valenzelektronen durch die Orbitalwechselwirkung. In rot angedeutet sind die Energieniveaus, in grau angedeutet die Potentialbarrieren durch die Kernladung.

#### 1.3 Der piezoelektrische Effekt

In diesem Versuch ist es von hoher Wichtigkeit die Position der Messspitze sehr präzise auf extrem kleinen Größenskalen bewegen zu können. Hierfür wird der piezoelektrische Effekt verwendet. Es gibt Materialien, welche eine Kristallstruktur aufweisen welche es ermöglicht, diese durch anlegen eines elektrischen Felds zu verformen. Dies ist in Abb. 3 einmal schematisch dargestellt.



Abbildung 3: Darstellung des piezoelektrischen Effekts. Dargestellt ist die Kraft welche die Ladungs schwerpunkte  $R_+$  und  $R_-$  auseinader zieht.

#### 1.4 Graphit

Bei einer der untersuchten Proben handelt es sich um Graphit. Graphit gehört zu der Gruppe der Halbmetalle, da es entlang der Basalebenen leitende Eigenschaften hat, senkrecht zu den Ebenen jedoch nicht. Um genauer zu verstehen was in diesem Versuch bei Graphit beobachtet werden kann ist die Ebenenstruktur des Graphits in Abb. 4 schematisch dargestellt. Wie in Abb. 4 zu erkennen ist sind die Basalebenen so zueinander



Abbildung 4: Darstellung der Ebenenstruktur des Graphits. Darstellung der  $\alpha$ -Atome in rot und der  $\beta$ -Atome in schwarz.

gerichtet, dass es Atome gibt die in der Ebene unterhalb und überhalb jeweils einen Partner haben und solche die überhalb und unterhalb keinen Partner haben. Dieser Umstand führ zu unterschiedlichen Bindungsenergien, was zur Folge hat, dass in diesem Versuch nur die  $\beta$ -Atome sichtbar sind.

## 2 Versuchsaufbau und Durchführung

## 2.1 Aufbau

Das Rastetunnelmirkroskop besteht grundsätzlich aus einer Spize einem Probenhalter und drei Piezoelementen. An Probe und Spitze ist eine Spannung angelegt. Nun kann ein Bereich der Probe mit Hilfe der Piezoelemente abgefahren werden und das Tunnelstromsignal gemessen werden. Um den Aufbau vor Vibrationen zu schützen befindet sich dieser auf einer separaten Platte an der Wand und ist auf einem Schaumstoffmaterial gelagert, welches den Aufbau mechanisch entkoppeln soll. Weiterhin steht eine schallisolierende Box zur Verfügung um den Aufbau außerdem vor Schwingungen in der Umgebungsluft zu schützen. Um die Bewegung der Spitze und der Probe zu steuern steht ein Computer mit entsprechender Software zur Verfüngung. Die Bewegung des Zylinders auf dem die Probe per Magnet befestigt ist, kann zur groben Vorjustage am PC gesteuert werden. Die Feinjustage erfolgt dann automatisch. In Abb. 5 ist der Aufbau schematisch dargestellt.



Abbildung 5: Schematische Darstellung des Versuchaufbaus.

#### 2.2 Durchführung

Zu Beginnn des Veruchs muss zunächst eine Messspitze produziert werden. Hierzu wurde ein spezieller Draht verwendet. Mit einer Zange wurde ein Drahtende festgehalten und eine circa 5 mm lange Spitze gezogen, indem man mit Hilfe eines Seitenschneiders den Draht leicht zusammendrückt und dann nach vorne abzieht. Diese Spitze wird dann in den Messaufbau eingesetzt. Anschließend wird mit Hilfe des Steuerungsprogramms der Zylinder mit der Probe an die Spitze herangefahren. Der Abstand zwischen Spitze und Probe kann mit einer am Aufbau befindlichen Lupe überprüft werden. Nun wird der Approach gestartet, dies kann einige Zeit dauern. Es kann passieren dass die Spitze beim Approachen in die Probe fährt, dann kann neu approached werden, es ist allerding wahrscheinlich dass die Spitze danach nicht mehr für eine Messung tauglich ist. Am PC kann für die Messung der Messbereich gewählt werden, sprich die abzurasternde Fläche, außerdem kann der Tunnelstrom eingestellt werden, welcher konstant gehalten werden soll (Constant Current Mode). Auch die angelegte Spannung kann gewählt werden. Für Graphit hat sich bei der durchgeführten Messung schließlich die Standardeinstellung bewährt, es wurde allerdings versucht durch Variation des Stroms und der Spannung ein genaueres Approachen zu gewährleisten.

Die Messung wurde für eine Graphitprobe und eine Goldprobe durchgeführt. Allerdings gelang die Goldmessung nicht mit einer zufriedenstellenden Qualität. Da die Spitze zunächst an Graphit getestet werden musste, kam es auch vor dass eine mit Graphit für verwertbar empfundene Spitze beim Versuch der Goldmessung zerstört wurde.

## 3 Auswertung und Fehleranalyse

#### 3.1 Untersuchung von Graphit

Graphit ist das am einfachsten aufzulösende Material der drei zur Verfügung stehenden proben, daher wurden alle gezogenen Spitzen zunächst an Graphit getestet. Im Verlauf der Versuchsdurchführung gelang eine Spitze zu ziehen, die auswertbare Ergebnisse lieferte. In Abb. 6 sind die Plots dargestellt, welche durch Öffnen der aufgenommenen Daten mit dem Auswerteprogramm WSxM [WSxM] entstehen. Die Plots ähneln stark den Bildern, die direkt während der Durchführung erzeugt wurden. Die in Abb. 6 dargestellten und später



Abbildung 6: Darstellung der vier Plots, die für jeden Messvorgang entstehen.

auch ausgewerteten Bilder wurden mit einer Bildgröße von 12 nm, einer Messzeit von 0,2 s pro Linie und 256 Linien aufgenommen. Die angelegte Spitzenspannung lag bei 54 mV und als Set-Point beim Heranfahren der Spitze wurde 1 nA gewählt. Es wurden mit der gleichen Spitze auch Bilder mit anderen Einstellungen aufgenommen, die unserer Vermutung nach genauere Ergenisse liefern sollten, die gezeigte Aufnahme ist jedoch die einzige, die tatsächlich auswertbar ist. Die ursprüngliche Vermutung, dass man aus dem Muster im Bild erkennen könnte, ob dieses auswertbar ist, hat sich bei uns nicht bewahrheitet. In den unteren zwei Bildern ist den Erwartungen gemäß wenig zu erkennen, was ein gutes Zeichen ist, da ein gleichmäßiges Bild beim Tunnelstrom für wenig äußere Störungen spricht. Betrachtet man die Bilder genauer und führt eine Art Testauswertung durch, so erkennt man auch im eigentlich konstanten Tunnelstrom Struktur, die Messung ist also nicht so frei von Außeneinflüssen wie eigentlich vermutet. Zur Bestimmung des Gitterabstands in



(a) Vergrößerung der Transformation von Abb. 6b. Es sind sechs hellere Punkte erkennbar, welche die Ecken eines Haxagons bilden.

(b) Ergebnis nach Rücktransformation von Abb. 6b mit Hilfe dargestellten S der Filter-Funktion von WSxM.

(c) Surface-Plot der in Abb. 6b dargestellten Struktur.

#### Abbildung 7: Aufbereitung der aufgenommenen Daten

Graphit wurde Abb. 6b verwendet. Mit Hilfe von WSxM wurde eine Filterung im Fourierraum durchgeführt. Dazu wurde in das Bild gezoomt und die Ecken eines Haxagons, wie es in Abb. 7a dargestellt ist, makiert. Die Filter-Funktion erstellt dann mit Hilfe der ausgewählten Punkte ein gefiltertes Bild wie in Abb. 7b dargestellt. In diesem Bild kann man nun eine Wabenartige Struktur erkennen. Nun wurden mit einer Measure-Funktion fünf



(a) Wabenstruktur nach Filterung der aufgenommenen Daten. Es wurden fünf verschiedene Abstände (von oben links nach unten rechts durchnummeriert) vermessen und die Abstände, sowie die Anzahl der Minima bestimmt.



(b) Plot nach Makierung eines Abstandes (hier Nr. 1).

Abbildung 8: Auswertung der Messung nach Filterrung mittels Fouriertransformation

verschiedene Abstände makiert und vermessen. Für jeden Abstand in Abb. 8a erhält man einen Plot Abb. 8b, dem man die Entfernung der makierten Punkte, sowie die Anzahl der Minima entnehmen kann. Die Strecke s zwischen den Punkten muss nicht aus dem Plot abgelesen werden, sondern wird vom Programm ausgegeben. Wir erhalten für die fünf makierten Linien

$$s_1 = 1,046 \text{ nm bei 5 Minima},$$
  
 $s_2 = 1,939 \text{ nm bei 9 Minima},$   
 $s_3 = 2,105 \text{ nm bei 10 Minima},$  (4)  
 $s_4 = 2,589 \text{ nm bei 12 Minima und}$   
 $s_5 = 0,895 \text{ nm bei 4 Minima}.$ 

Da das Programm keinen Fehler ausgibt, wurde ein Fehler von  $s_s=0,005\,{\rm nm}$ auf die gemessenen Werte geschätzt.

Um nun den Gitterabstand der  $\beta$ -Atome zu bestimmen wurden die gemessenen Werte jeweils durch die Anzahl der dazwischenliegenden Minima geteilt und dann ein Mittelwert gebildet. Man erhält somit

$$d_{\beta} = (2,149 \pm 0,003) \,\text{\AA},\tag{5}$$

wobei der Fehler mit gaussscher Fehlerfortpflanzung bestimmt wurde.

#### 3.2 Untersuchung von Gold

Die von uns gezogene Spitze hat bereits bei Graphit sehr schlechte Ergebnisse geliefert. Trotzdem wurden zwei Aufnahmen der Goldprobe erstellt, danach ist die Spitze kaputt gegangen.

Eine Aufnahme von Gold wurde bei einer Bildgröße von  $0,14\,\mu\text{m}$  und einer Spitzenspannung von  $0,54\,\text{mV}$  gemacht. Die Zeit pro Linie wurde bei 256 Linien zu  $0,4\,\text{s}$  gewählt.



Abbildung 9: Aufnahme von Gold

In Abb. 9 ist der aufgenommene Plot dargestellt. Zoomt man näher in den Plot und versucht eine Auswertung wie bei Graphit durchzuführen, so erkennt man keinerlei Struktur. Da Gold ein Metall ist und die Elektronendichte daher kaum variiert, ist auch keine atomare Auflösung zu erwarten. Bei der untersuchten Probe handelt es sich aber laut [FP] um eine goldbeschichtete Struktur, diese sollte also eigentlich erkennbar sein. Bei der von uns erstellten Aufnahme ist dies nun nicht erkennbar, die könnte zum einen daran liegen, dass die Spitze minderwertiger Qualität war, zum anderen wurde der Scanbereich zu klein gewählt. Bei dem Versuch dies zu beheben und ein weiteres Bild mit einem größeren Scanbereich aufzunehmen, wurde die Spitze beschädigt und das Bild ist nicht brauchbar.

An der Goldstrukturprobe hätte man außerdem noch überprüfen können, ob eine Drehung der Probe tatsächlich auch zu einem gedrehten Bild führt und ob ein geräteinternes Drehen tatsächlich zu einer Drehung führt. Diese zwei Sachen kann man, besonders bei der Qualität unserer Spitze nur schwierig bei Graphit nachweisen, da eine periodische Struktur auch in gedreht noch periodisch ist.

#### 3.3 Untersuchung eines Halbleiters

Die Untersuchung der Halbleiterprobe wurde von uns, auf Grund einer fehlenden Spitze nicht durchgeführt. Hierbei wäre interessant gewesen, ob das Umpolen der Spitzenspannung tatsächlich zur Aufnahme anderer Strukturen führt, wie es bei einem Halbleiter zu erwarten ist. Das Ziel wäre gewesen zum einen das Leiterband und bei umgepolter Spannung das Valenzband zu vermessen.

### 4 Diskussion der Ergebnisse

Mit Hilfe einer selbstgezogenen Spitze wurde eine Aufnahme von Graphit erstellt und ein Gitterabstand der  $\beta$ -Atome von

$$d_{\beta} = (2,149 \pm 0,003) \,\text{\AA} \tag{6}$$

ermittelt. Der Literaturwert nach [Gr] liegt bei

$$d_{\rm lit.} = 2,46 \,\text{\AA}.$$
 (7)

Der von uns ermittelte Wert liegt also in der richtigen Größenordnung, aber in ungefähr 15% Abstand zum erwarteten Wert. Dies könnte unterschiedliche Gründe haben, die auch zusammen zu sehr verwaschen Ergebnissen führen können.

Die Goldprobe wurde nicht zufriedenstellend vermessen, jesoch lässt das aufgenommene Bild vermuten, dass es mit einer besseren Spitze möglich ist verschwommene Elektronenwolken aufzunehmen.

Da keine wirklichen Ergebnisse ermittelt wurden, blieb während der Versuchsdurchführung reichlich Zeit, sich Gedanken über die Problematiken des Versuchsaufbaus zu machen.

Zum einen baut der gesamte Versuch darauf auf, dass es gelingt eine möglichst einatomare Spitze zu ziehen. Zur Verfügung stehen dafür Draht, eine Pinzette und ein kleiner Seitenschneider. Beim Spitzenziehen handelt es sich mit dieser Ausstattung somit, abgesehen von ein wenig Talent im Befolgen der Anleitung um einen rein statistischen Prozess. Mit der zur Verfügung stehenden Lupe kann man, da das Ziel eine einatomare Spitze ist, nicht beurteilen, ob es sich bei der gezogenen Spitze um ein brauchbares Produkt handelt. Auch durch die Lupe auf der Messapparatur kann man dies leider nicht festellen. Es muss also jede Spitze getestet werden in der Hoffnung ein Bild zu bekommen.

Ein weiteres Problem ist die Approach-Funktion der Messapparatur. Zunächst wurde die Probe manuell möglichst nah an die Spitze gefahren, was nur teilweise funktioniert hat. Ist die Probe falsch positioniert oder der Messaufbau leicht fettig oder verschmutzt (was relativ oft der Fall ist, da die Probe zum Wechseln einer jeden Spitze entfernt werden muss), so nähert sich die Probe nicht an. Ist dieses Problem durch Drehen der Probe oder kurzes Putzen des Ausbaus behoben, so kann man die automatische Approach-Funktion nutzen. Diese sollte die Probe bis zum einem vorher eingestellten Ziel-Tunnelstrom an die Spitze heranfahren und dann eine Messung starten. Die meisten Versuche endeten bei uns ohne Messung, da entweder die Probe nicht herangefahren wurde oder sofort in die Spitze gecrasht ist. Es wurde Versucht dies durch unterschiedliche Spitzenspannungen zu lösen, dies hat aber in den meisten Fällen zu unbrauchbaren Bildern und bei Verringern der Spannung dann wieder zum Crash geführt.

Leicht zu verbessern wäre vermutlich die Qualität der Proben. Die zur Verfügung stehende Graphitprobe hat so tiefe Kerben, dass auch ein Abtragen der obersten Schicht nicht zu einer ebenen Oberfläche führt. Es wurde versucht durch Drehen der Probe die tiefen Kerben so zu positionieren, dass sie nicht vermessen werden, aber dies hat teilweise dazu geführt, dass die Pobe nicht mehr vernünftig an die Spitze herangefahren wurde. Auch die Goldschicht war ziemlich zerkratzt und auch wenn es nicht dazu kam die Halbleiterprobe zu vermessen, so wäre die vermutlich kaum möglich gewesen, da bei einer stark unebenen Oberfläche die Wahrscheinlichkeit steigt, dass die Spitze in die Probe fährt.

Ein letzter Punkt sind die problematischen Außeneinflüsse. Vibrationen führen in der Theorie zu einem nicht unerheblichen Einfluss bei der Vermessung von atomaren Strukturen. Ein Versuchsaufbau, der im ersten Stock an die Wand geschraubt und mit einer verhältnismäßig leichten Platte auf einer Schaumpolsterung geschützt ist, in vermutlich nicht genügend vor äußeren Einflüssen geschützt. Auch die vorhandene Mysterybox hat zumindest augenscheinlich nicht viel an diesem Zustand geändert. Die Aufnahmen des Tunnelstroms sollten dazu dienen bereits während des Versuches möglichst viele Außeneinflüsse durch geeignete Wahl der Parameter zu eliminieren, allerdings erscheint das Bild, was zur Zwischenauswertung zur Verfügung steht bereits sehr früh glatt. Bei der späteren Auswertung stellt sich dann heraus, dass teilweise deutlich Strukturen erkennbar sind. Nur testweise wurde eine kurze Auswertung der Strukturen durchgeführt und es lassen sich interessante Ergebnisse aus konstanten Daten extrahieren Anhang B. Der Tunnelstrom scheint also nicht so konstant, wie eigentlich angenommen, wobei dies, da periodische Strukturen vermessen wurden, vermutlich nicht nur an äußeren Einflüssen liegt.



## A Graphen der weiteren eingezeichneten Abstände

Abbildung 10: Auswertung der Messungen an Graphit zur Bestimmung des Gitterabstandes

# B Testweise Auswertung des eigentlich konstanten Tunnelstroms

Während der Auswertung ist aufgefallen, dass das Auswerteverfahren zur Bestimmung der Gitterstruktur auch auf den Tunnelstrom angewendet werden kann. Da im Constant Current-Mode der Spitzenstrom eigentlich konstant sein sollte, ist es eigentlich nicht zu erwarten, dass die Struktur ein sinnvolles Ergebnis für die Gitterstruktur liefert. Durch Auswertung der eingezeichneten Abstände ermittelt man einen Gitterabstand von 2,19 Å.

Die einzige Erklärung, die uns bisher für eine so deutliche Struktur einfällt ist, dass der Spitzenstrom nicht komplett konstant gehalten wied, sondern in gewissen Maße von den



Abbildung 11: Testweise Ausmessung der Messung des Spitzenstroms aus Abschnitt 3.1

gemessenen Tunnelelektronen abhängt, daher die Spitze nicht wie gewünscht auf den Tunnelstrom reagiert.

## Abbildungsverzeichnis

1	Darstellung des Tunneleffekts am eindimensionalen Beispiel durch eine Potentialbarriere der Höhe $V_0$	1
2	Veranschaulichung der Energieaufspaltung der Valenzelektronen durch die Orbitalwechselwirkung. In rot angedeutet sind die Energieniveaus, in grau angedeutet die Potentialbarrieren durch die Kernladung	2
3	Darstellung des piezoelektrischen Effekts. Dargestellt ist die Kraft welche die Ladungs schwerpunkte $R_+$ und $R$ auseinader zieht	2
4	Darstellung der Ebenenstruktur des Graphits. Darstellung der $\alpha$ -Atome in rot und der $\beta$ -Atome in schwarz.	3
5	Schematische Darstellung des Versuchaufbaus	4
6	Darstellung der vier Plots, die für jeden Messvorgang entstehen. $\ldots$ .	5
7	Aufbereitung der aufgenommenen Daten	6
8	Auswertung der Messung nach Filterrung mittels Fourier transformation $\ .$ .	6
9	Aufnahme von Gold	7
10	Auswertung der Messungen an Graphit zur Bestimmung des Gitterabstandes 1	11
11	Testweise Ausmessung der Messung des Spitzenstroms aus Abschnitt 3.1 1	12

# Literatur

- [FP] "Versuchsanleitung Fortgeschrittenenpraktikum Teil 1, Rastertunnelmikroskop, M. Köhli, S. Röttinger" Stand 10/2013.
- [WSxM] "Horcas, R. Fernandez, J.M. Gomez-Rodriguez, J. Colchero, J. Gomez-Herrero and A. M. Baro, Rev. Sci. Instrum. 78, 013705 (2007)"
- [Gr] https://de.wikipedia.org/wiki/Graphit