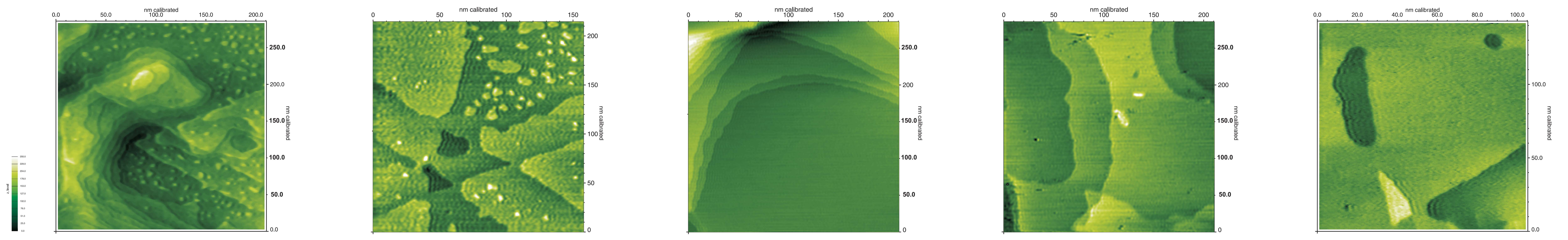




# Ergebnisse mit dem F.P.-Tunnelrastermikroskop (STM) auf Gold/Glimmer

Ulrich H. Bartell, Martin Stachel, Physikalisches Fortgeschrittenenpraktikum



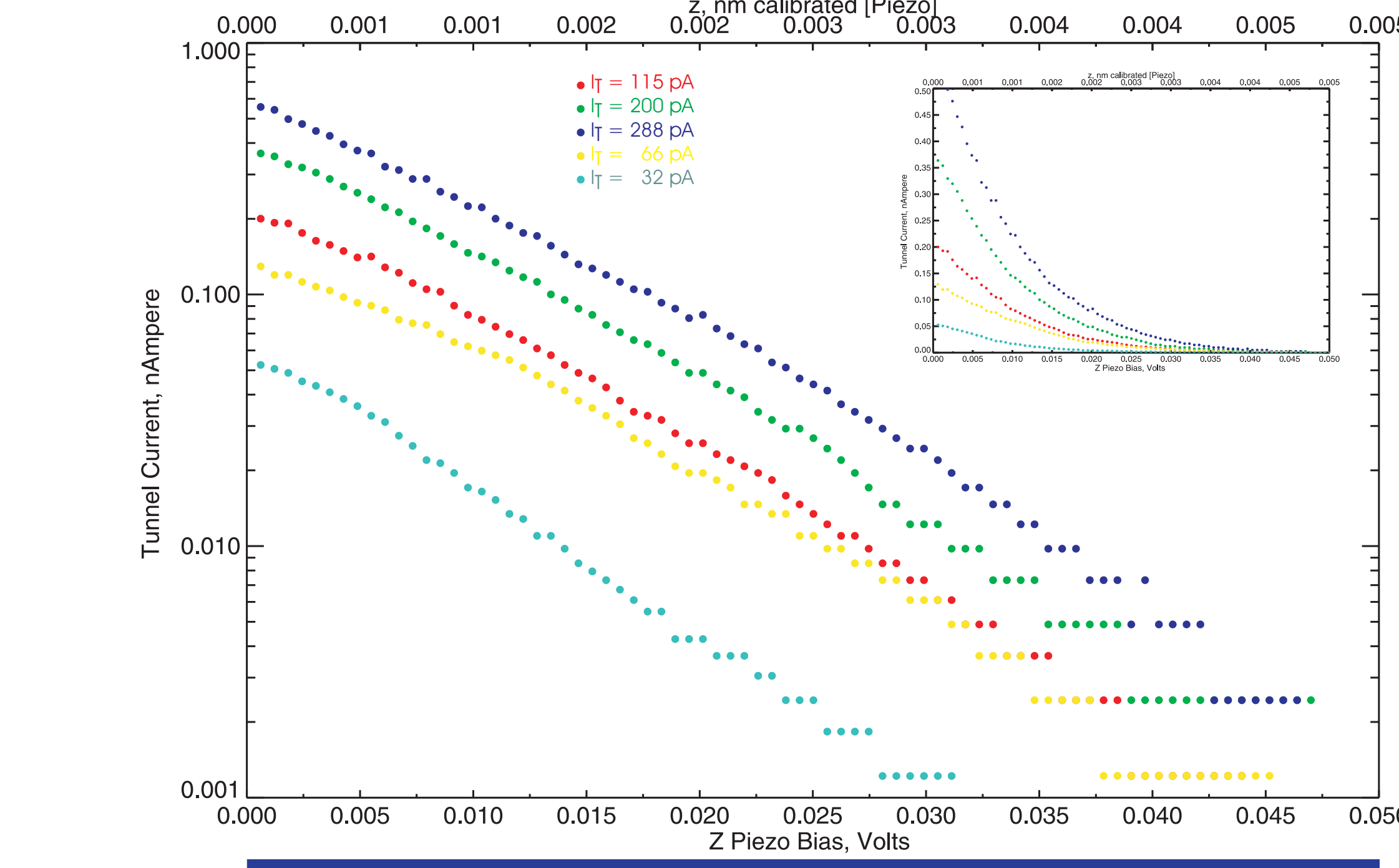
Topografische STM Rasterabbildung mit Terrassen  
 $I_T = 32 \text{ pA}$   $U_T = 4 \text{ mV}$

$I_T = 603 \text{ pA}$   $U_T = 20 \text{ mV}$

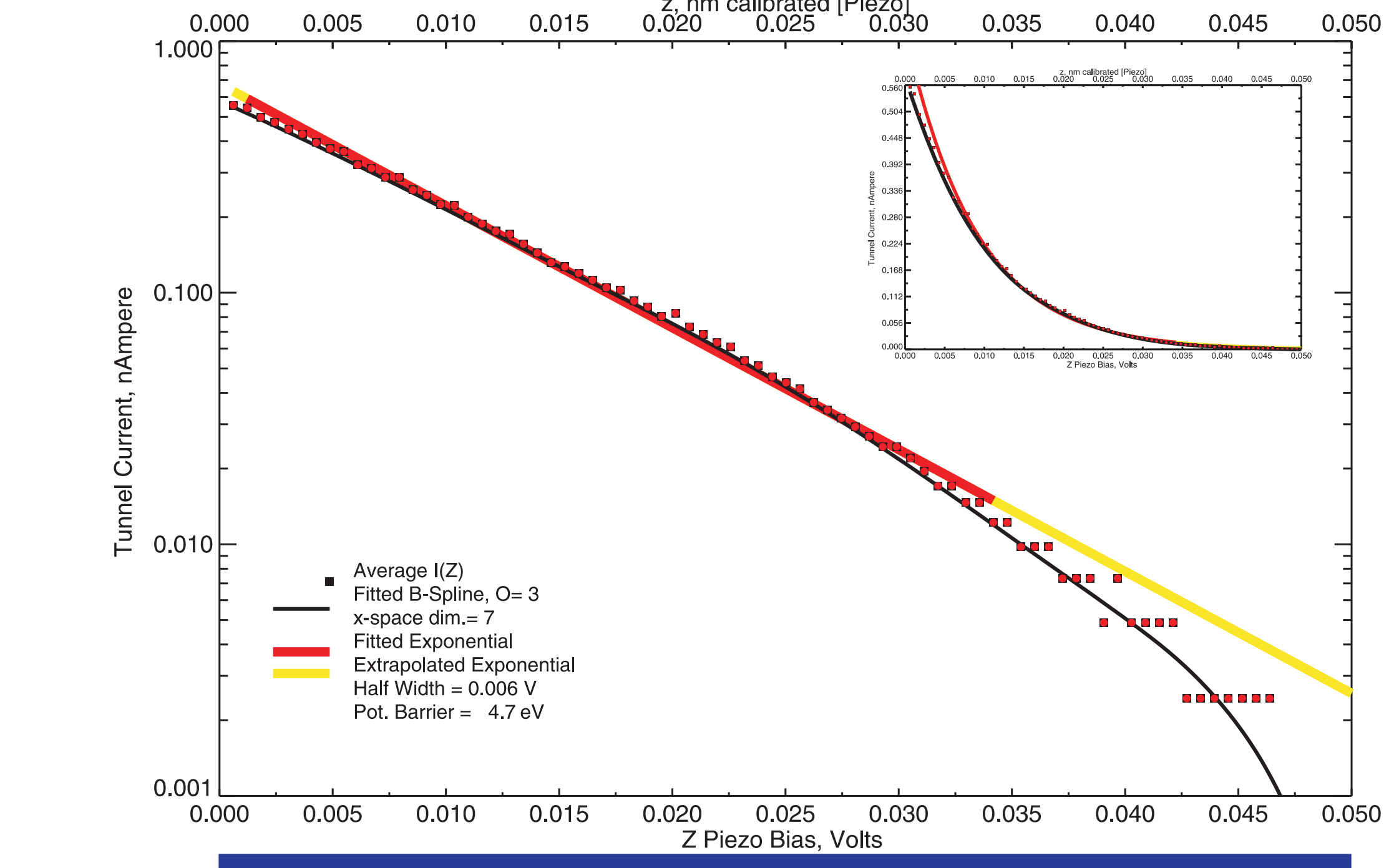
$I_T = 115 \text{ pA}$   $U_T = 12 \text{ mV}$

$I_T = 138 \text{ pA}$   $U_T = 12 \text{ mV}$

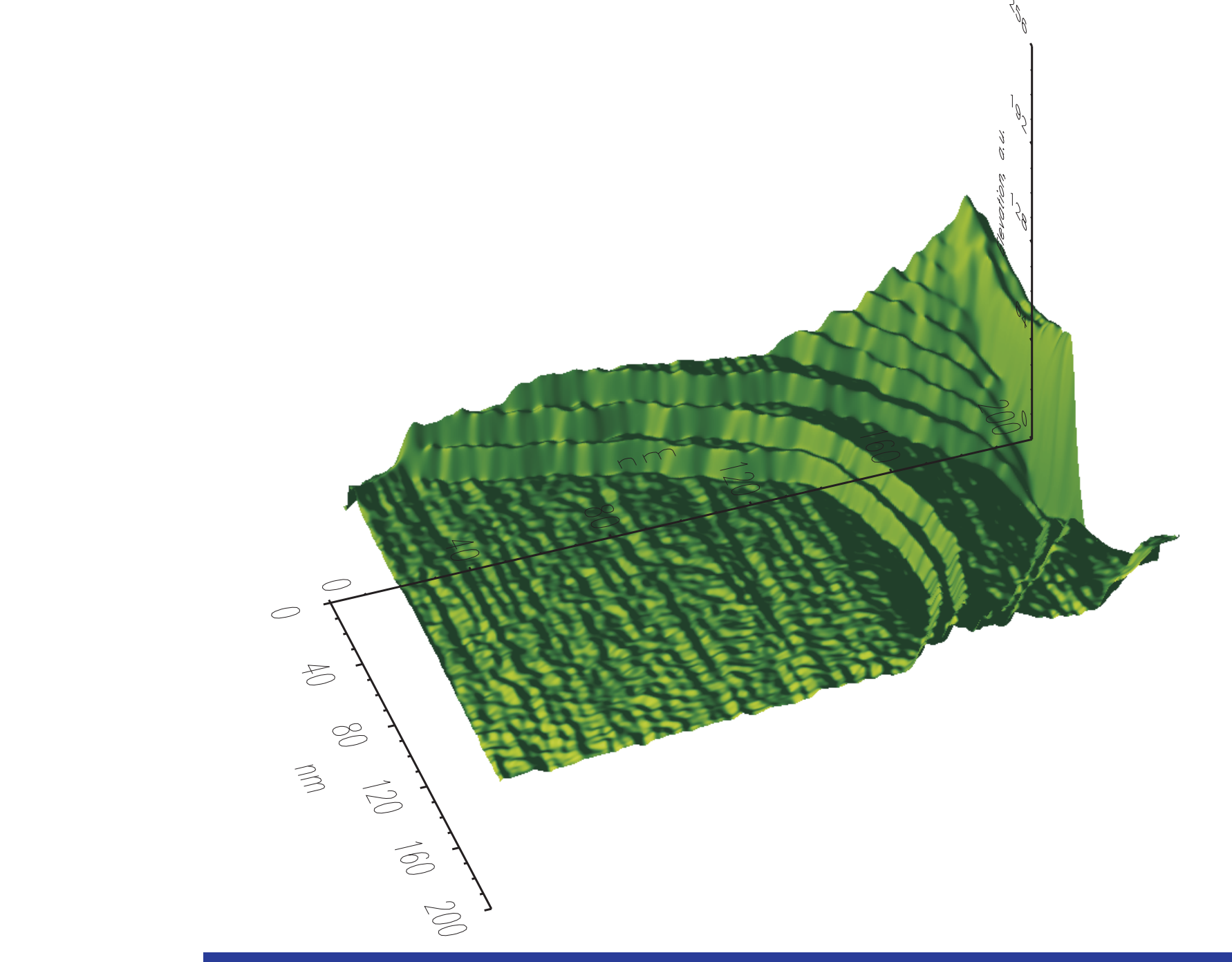
$I_T = 115 \text{ pA}$   $U_T = 12 \text{ mV}$



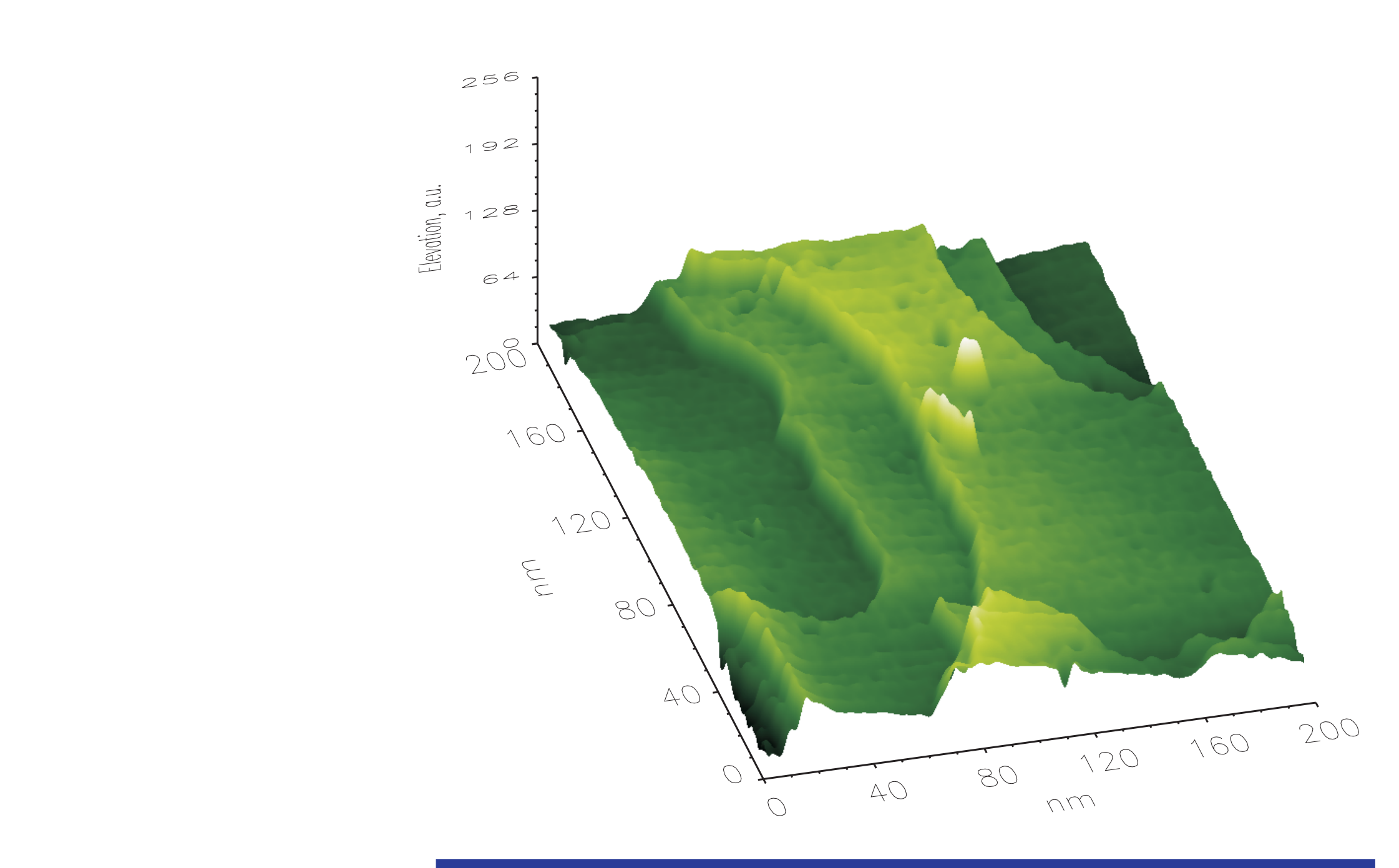
I(Z)-Spektroskopie bei verschiedenen Tunnelströmen



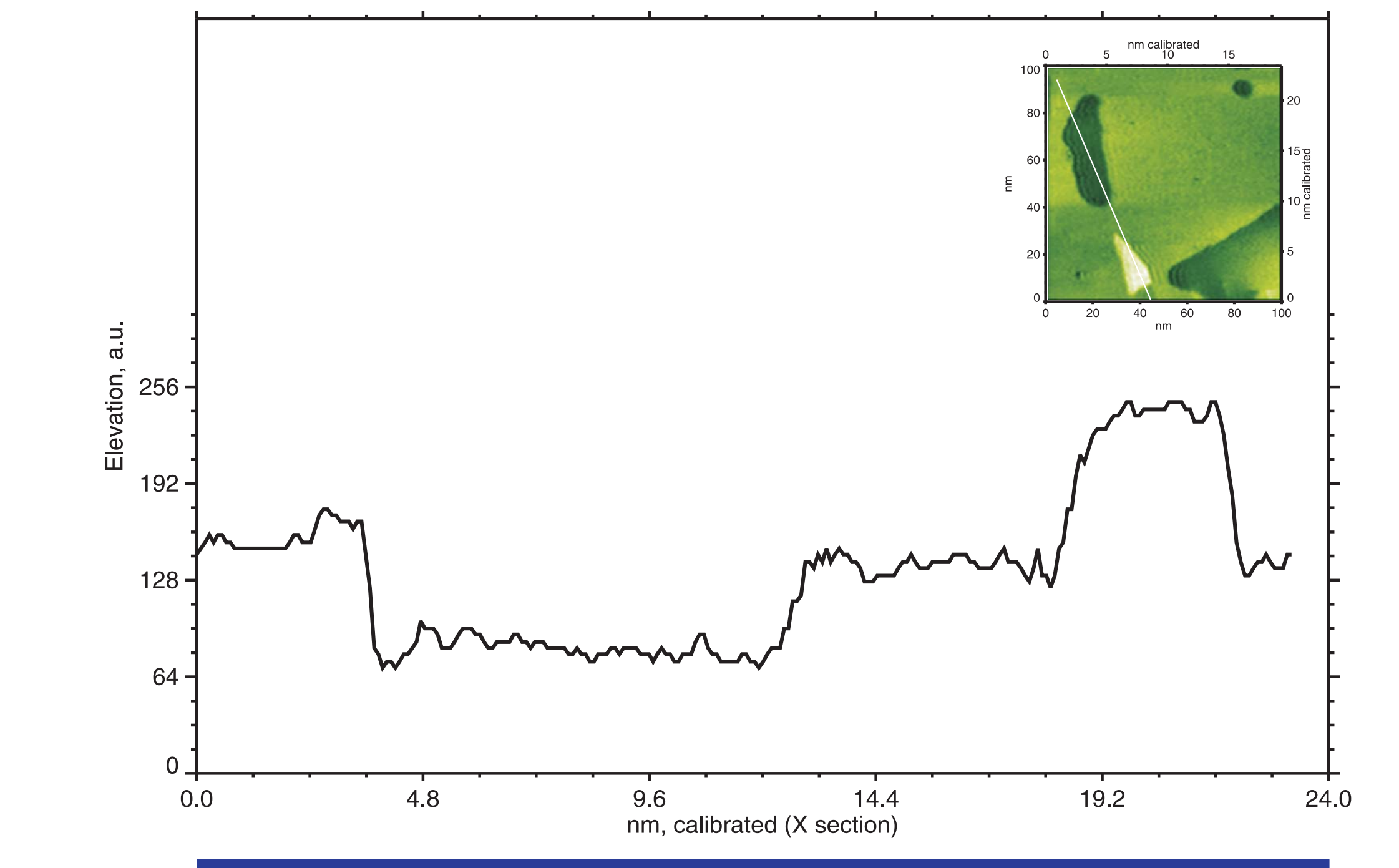
I(Z)-Spektroskopie bei  $I_T = 288 \text{ pA}$   
 Die Potentialbarriere wurde mit einer z-Empfindlichkeit von  $1 \text{ mV/nm}$  berechnet



Pseudo 3D-Darstellung der 2D-STM Stromfläche  
 Die Oberflächenelemente werden durch eine virtuelle Lichtquelle beleuchtet (Gouraud-Shading)



Pseudo 3D-Darstellung der 2D-STM Stromfläche  
 Die Oberflächenelemente werden mit den Stromströmen (flatcolor) (Shading by Elevation)



Darstellung der atomaren Terrassenstufen mit der Profilkurve

## Die x,y-Abhängigkeit des Tunnelstroms beim STM

Der Tunnelstrom  $I_T$  setzt sich zusammen aus der sowohl über die Potentialbarriere  $\phi(x,y)$  als auch über den Tunnelabstand  $d(x,y)$  von den lateralen Koordinaten  $x, y$  abhängigen Funktion sowie der ortsabhängigen elektronischen Zustandsdichte  $\rho(x,y,z)$  (Local Density of States LDOS)

$$I_T(x,y,z) = I_T^0(\phi(x,y), d(x,y), U_T) \cdot \rho(x,y,z) \quad (1)$$

wobei  $U_T$  die an die Tunnelstrecke angelegte Spannung ist. Eine Variation  $\delta I_T$  des Tunnelstromes tritt während des Rasterprozesses der Tunnelspitze auf, wenn die lokalen Inhomogenitäten der Festkörperoberfläche zu einer Schwankung der Austrittsarbeit  $\delta\phi$  und/oder zu einer Schwankung des Tunnelabstandes  $\delta d$  infolge der lokalen Topografie Anlaß geben. Aus Glg.(1) erhält man mit Hilfe der Produktregel für das totale Differential:

$$\delta I_T = I_T^0 \cdot \delta \rho(x,y,z) + \rho \cdot \frac{\partial I_T^0}{\partial \phi} \cdot \delta \phi(x,y) + \rho \cdot \frac{\partial I_T^0}{\partial d} \cdot \delta d(x,y) \quad (2)$$

Die STM-Betriebsart bei konstantem Tunnelstrom ist definiert durch

$$I_T = \text{const.}, \text{ i.e. } \delta I_T = 0. \quad (3)$$

Damit folgt aus Glg.(2) für den Tunnelabstand  $d(x,y)$  als Funktion der Koordinaten auf der Oberfläche:

$$-\delta d(x,y) = -\frac{1}{\kappa_0} \cdot \delta \ln \rho(x,y,z) + \frac{1}{\left(\frac{\partial I_T^0}{\partial d}\right)} \cdot \delta \phi(x,y) \quad (4)$$

wobei  $\left(\frac{\partial \ln I_T^0}{\partial d}\right) \approx -\kappa_0$  gesetzt wurde und  $\kappa_0 = \sqrt{\frac{2m\phi_0}{\hbar^2}}$  die Tunnelabklänge ist. Der Ausdruck  $\left(\frac{\partial \phi}{\partial d}\right)$  gibt in allgemeiner Weise die Abhängigkeit der aktuellen Potentialbarriere  $\phi$  vom Tunnelabstand  $d$  an, wobei für große Tunnelabstände gilt  $\lim_{d \rightarrow \infty} \phi(d) = \phi_0$ .

$$-\delta d(x,y) = \frac{\epsilon_{zz} \delta V_z(x,y)}{\cos(\alpha(x,y))} \quad (5)$$

wo  $\cos(\alpha(x,y)) = \frac{\delta z(x,y)}{\delta d}$  der Richtungscosinus der lokalen Topografie gegenüber der z-Richtung und  $\epsilon_{zz}$  die zugehörige z-Piezokonstante des STM-Scanner ist (z.B.  $\epsilon_{zz} = 1 \text{ \AA/Volt}$ ) und  $\delta V_z$  die jeweilige Variation der z-Regelspannung darstellt (dies ist zugleich die Meßgröße), mit der  $\delta I_T^0 = 0$  erreicht wird.

Abbildung 1 Berechnete Zustandsdichte  $\rho(r, E_T)$  auf Au(110): links: (2x1), rechts: (3x1). Die Abbildung zeigt die (110) Ebene durch die äußerste Atomlage. Die Positionen der Atome sind durch ausgefüllte Kreise (innerhalb der Ebene) und ausgefüllte Quadrate (außerhalb der Ebene) markiert. Die Konturen konstanter Zustandsdichte  $\rho(r, E_T)$  sind in Einheiten von a.u.  $eV^{-1}$  angegeben.

Nach J. Tersoff und D.R. Hamann, Phys.Rev.Lett. 50 (1983) 1998.  
 Auf Festkörperoberflächen wie Gold, die nur aus einer Atomsorte ohne Verunreinigungen bestehen, ist die Austrittsarbeit lokal konstant, daher kann in diesem Fall  $\delta\phi = 0$  gesetzt werden und man erhält

$$\epsilon_{zz} \cdot \delta V_z(r_{\perp}) = \frac{-1}{\kappa_0} \left[ \cos(\alpha) \frac{\partial \ln \rho}{\partial r_{\perp}} \cdot \delta r_{\perp} + \frac{\partial \ln \rho}{\partial d} \cdot \delta z \right] \quad (6)$$

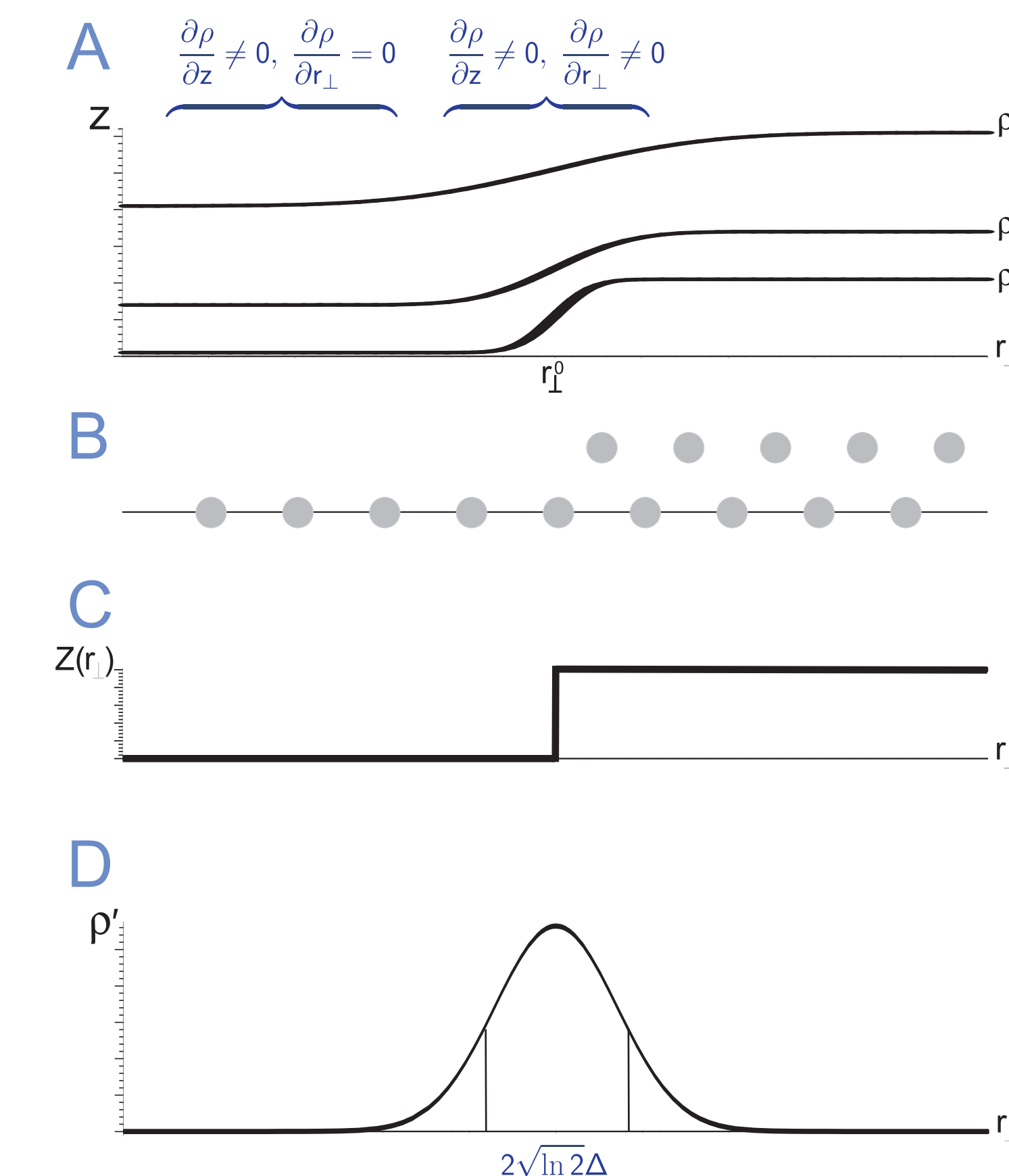


Abbildung 2 Modell einer Terrassenstufe auf Gold: A: Verlauf der Zustandsdichte  $\rho(r_{\perp}, z)$  wobei  $z_1 = z_1(p_1, r_{\perp})$ ,  $z_2 = z_2(p_2, r_{\perp})$  die Iso-Linien konstanter Zustandsdichte sind. B: Konfiguration der Atome der obersten Schicht an der Terrassenstufe. C: Topografische Sprung  $\Delta z$  an der Terrassenstufe. D: Der vom Modell angenommene Verlauf von  $\frac{\partial \rho}{\partial r_{\perp}} = \rho'(r_{\perp})$  an der Terrassenstufe

Anhand des in Abb.(2) dargestellten Verlaufs der Zustandsdichte  $\rho(r_{\perp}, z)$  erkennt man, daß nur in der Nähe der Terrassenstufe bei  $r_{\perp} = r_{\perp}^0$  die horizontale Ableitung  $\rho' = \frac{\partial \rho}{\partial r_{\perp}}$  merkbare Werte liefert. Dafür wird folgendes Modell angenommen:

$$\rho'(r_{\perp}, z) = \rho'(r_{\perp}^0, z) e^{-\frac{(r_{\perp} - r_{\perp}^0)^2}{\Delta(z)^2}}$$

$$\Delta(z) = \Delta_0 e^{\kappa(z - z_0)}$$

$$\rho'(r_{\perp}^0, z) = \rho'(r_{\perp}^0) e^{-\kappa(z - z_0)} \quad (7)$$

d.h. ein Gauß-förmiger Verlauf von  $\rho'$  mit der Breite  $\Delta$ . Demzufolge erhält man für  $\rho(r_{\perp})$  selbst:

$$\rho(r_{\perp}, z) = \rho_{-\infty}(z) + \rho'(r_{\perp}^0) \frac{\sqrt{\pi}}{2} \Delta_0 \left( 1 + \text{erf} \left( \frac{r_{\perp} - r_{\perp}^0}{\Delta(z)} \right) \right) \quad (8)$$

Dem horizontal inhomogenen Verlauf der Zustandsdichte liegt ein Sprung der atomaren Konfiguration (= Topografie) bei  $r_{\perp} = r_{\perp}^0$  zugrunde, der wie folgt angenommen werden kann (siehe Abb.(2 D)):

$$z(r_{\perp}) = \Delta z \cdot \Theta(r_{\perp} - r_{\perp}^0) \quad (9)$$

wo  $\Theta$  die Heaviside-Sprungfunktion ist.

ii. Auf den ebenen Gold-Terrassen gilt, bis auf die Modulation durch atomare Korrugation,  $\frac{\partial \rho}{\partial r_{\perp}} = 0$ ,  $\delta r_{\perp} \neq 0$  und man erhält damit aus Glg.(6) durch Integration über  $z$  für das Meßsignal  $V_{zz}$

$$-\epsilon_{zz} \cdot V_z(r_{\perp}, z_0) = \frac{\ln \rho(z_0)}{\kappa_0} \quad (10)$$

und damit ein konstantes Meßsignal  $V_z$ .

ii. An der Terrassenstufe gilt  $\frac{\partial \rho}{\partial r_{\perp}} \neq 0$ ,  $\delta r_{\perp} \neq 0$  und man erhält aus Glg.(2.14) unter der weiteren Annahme, daß (siehe [TerHa83])  $\frac{\partial \ln \rho}{\partial d} \approx -\kappa$  wobei  $\kappa$  nicht identisch mit  $\kappa_0$ , der Abklängekonstante des Tunnelstromes ist und mit dem Modellansatz Glg.(9)

$$\epsilon_{zz} \cdot \delta V_z(r_{\perp}) = \frac{1}{\kappa_0} \left( \kappa \Delta z \cdot \delta(r_{\perp} - r_{\perp}^0) - \cos(\alpha(r_{\perp})) \left( \frac{\partial \ln \rho}{\partial r_{\perp}} \right) \delta r_{\perp} \right) \quad (11)$$

Werden beide Seiten von Glg(11) über  $r_{\perp}$  integriert, erhält man nach einigen Umformungen und Approximation der partiellen Integration

$$\epsilon_{zz} \cdot V_z(r_{\perp}) \approx \frac{\kappa}{\kappa_0} \Delta z \cdot \Theta(r_{\perp} - r_{\perp}^0) - \frac{1}{\kappa_0} \frac{1}{\sqrt{1 + e^{-\frac{2(r_{\perp} - r_{\perp}^0)^2}{\Delta(z)^2}}}} \times \ln \left\{ 1 + \frac{\rho'(r_{\perp}^0) \sqrt{\pi}}{2 \rho_{-\infty}} \Delta_0 \left( 1 + \text{erf} \left( \frac{r_{\perp} - r_{\perp}^0}{\Delta(z)} \right) \right) \right\} \quad (12)$$

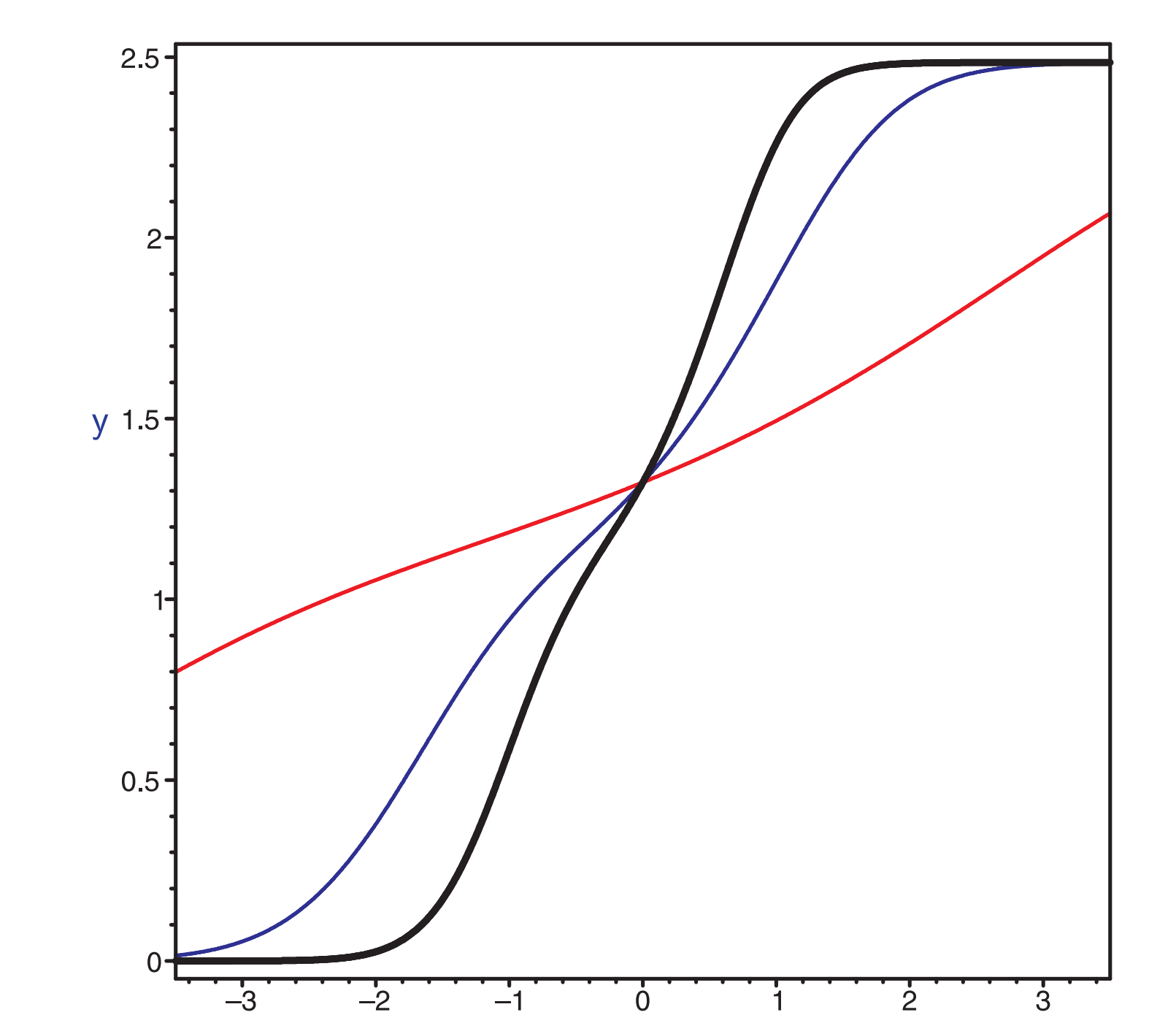


Abbildung 3 Abbildung des topografischen Terrassen Sprunges mit dem STM: Nach Glg.(12) berechneter Verlauf der Tunnelspannung  $\epsilon_{zz} \cdot V_z(r_{\perp})$  für  $\rho'_{\perp} = 0$ , dargestellt in den reduzierten Koordinaten  $x = r_{\perp} / \Delta_0$ ,  $y = \kappa_0 \cdot V_z(r_{\perp})$  für  $\kappa \cdot z = 0$  (schwarze Kurve),  $\kappa \cdot z = 0.5$  (blaue Kurve),  $\kappa \cdot z = 1.5$  (rote Kurve).

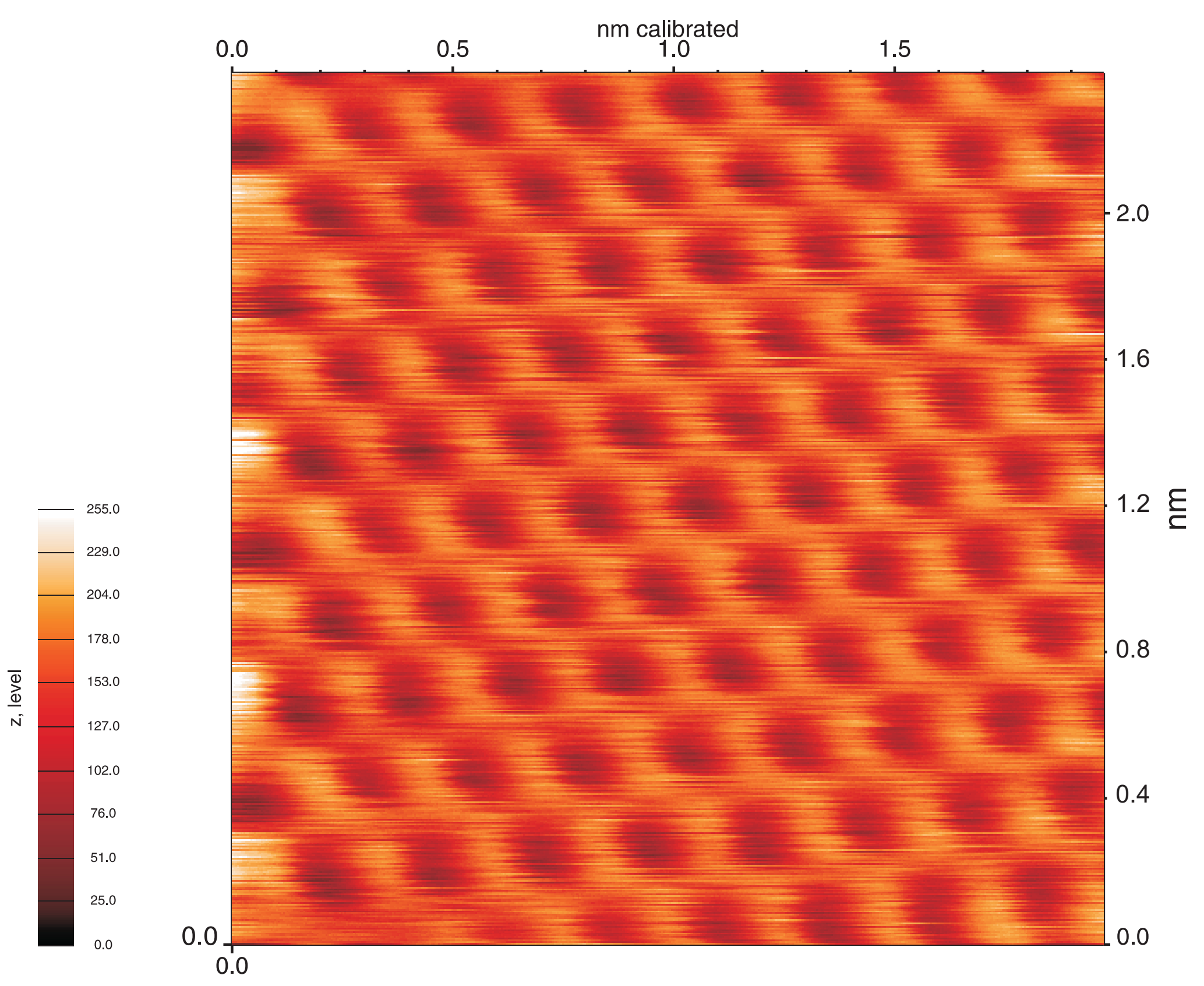
Literatur  
 [TerHa83] Tersoff, J.; Hamann, D.R.: Theory and Application for the Scanning Tunneling Microscope: Physical Review Letters 50 (1983), pp. 1998-2001.



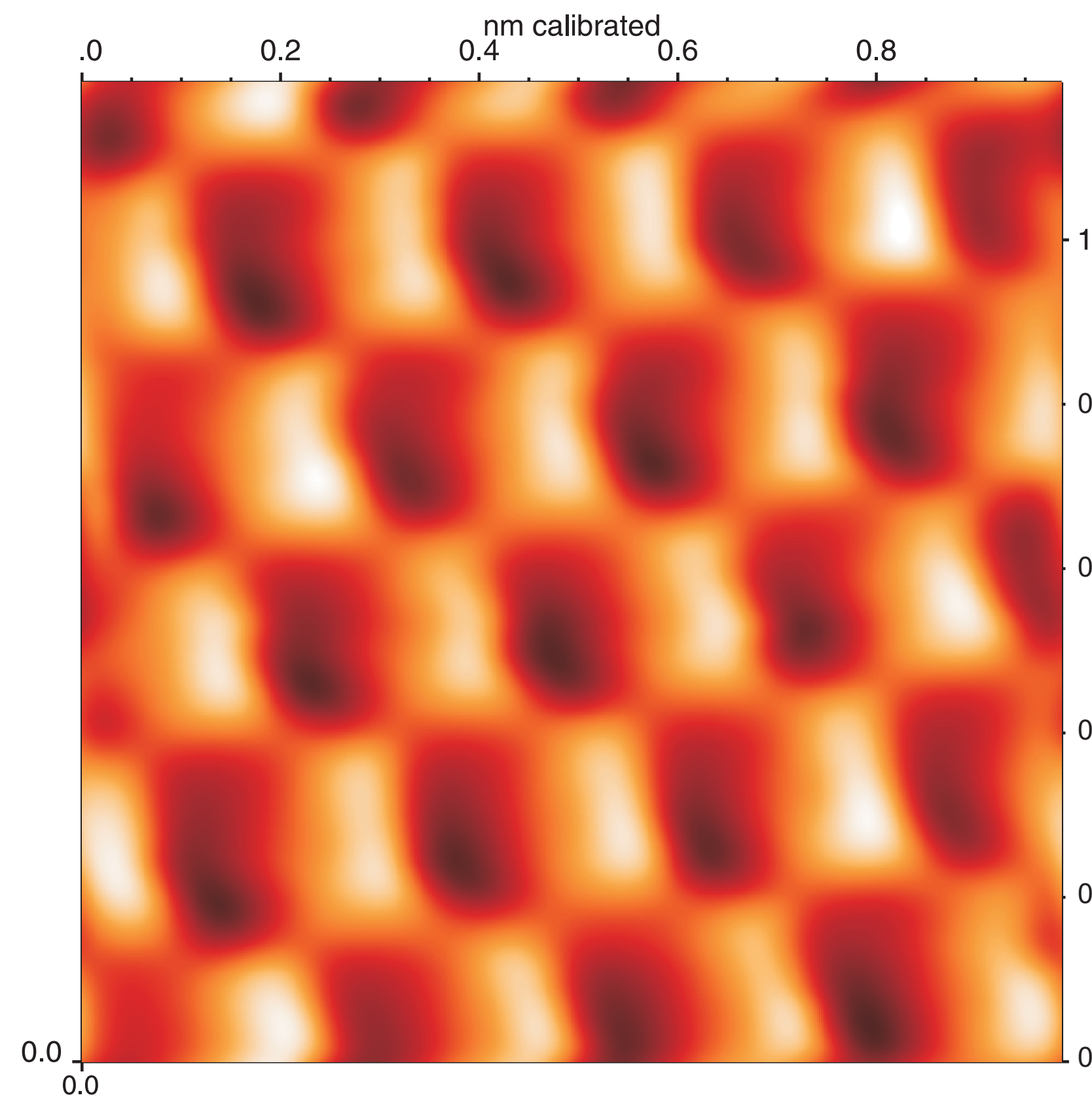


# Ergebnisse mit dem F.P.-Tunnelrastermikroskop (STM) auf HOPG, MoS<sub>2</sub> und TaS<sub>2</sub>

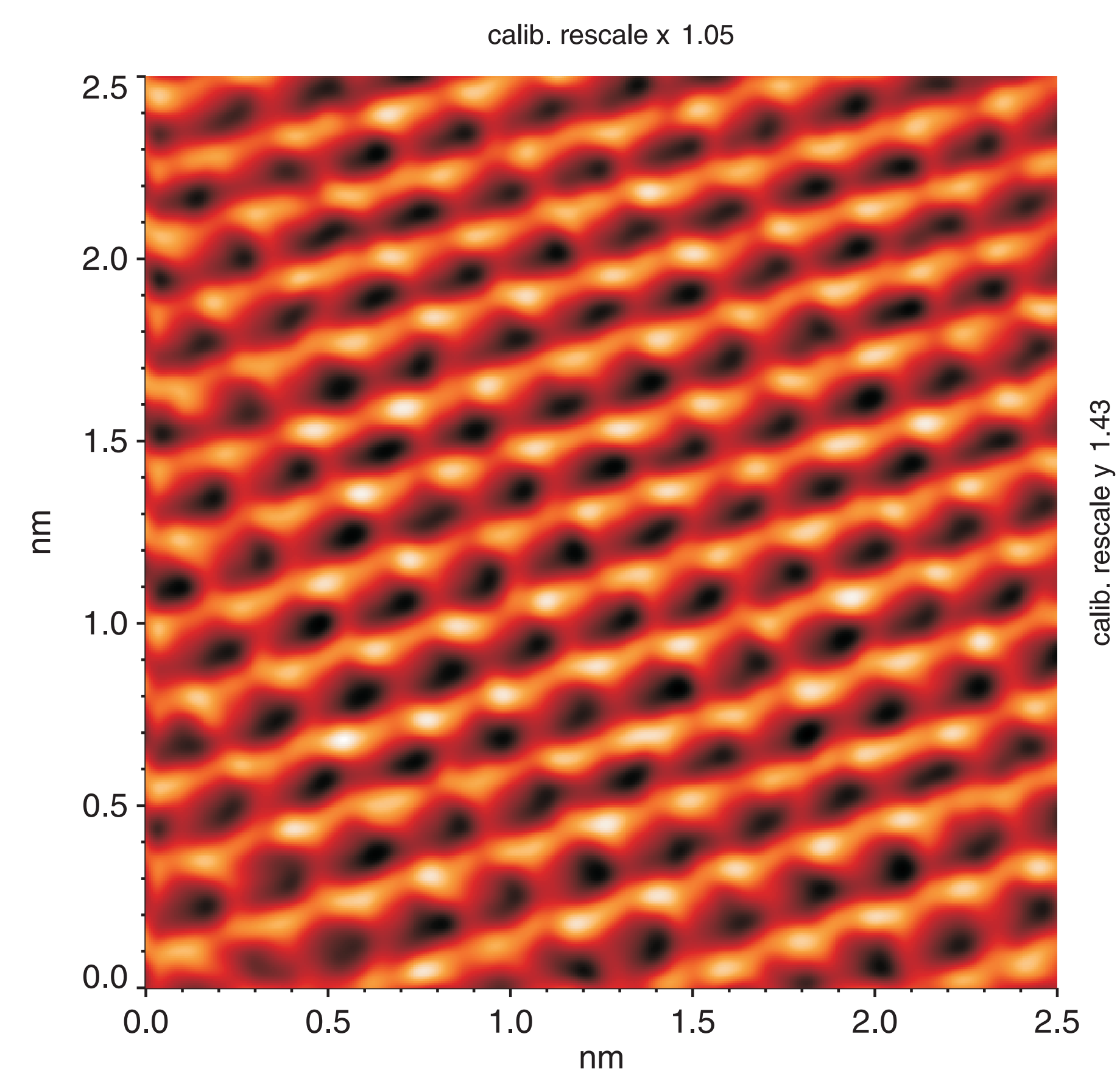
Ulrich H. Bartell, Martin Stachel, Physikalisches Fortgeschrittenenpraktikum



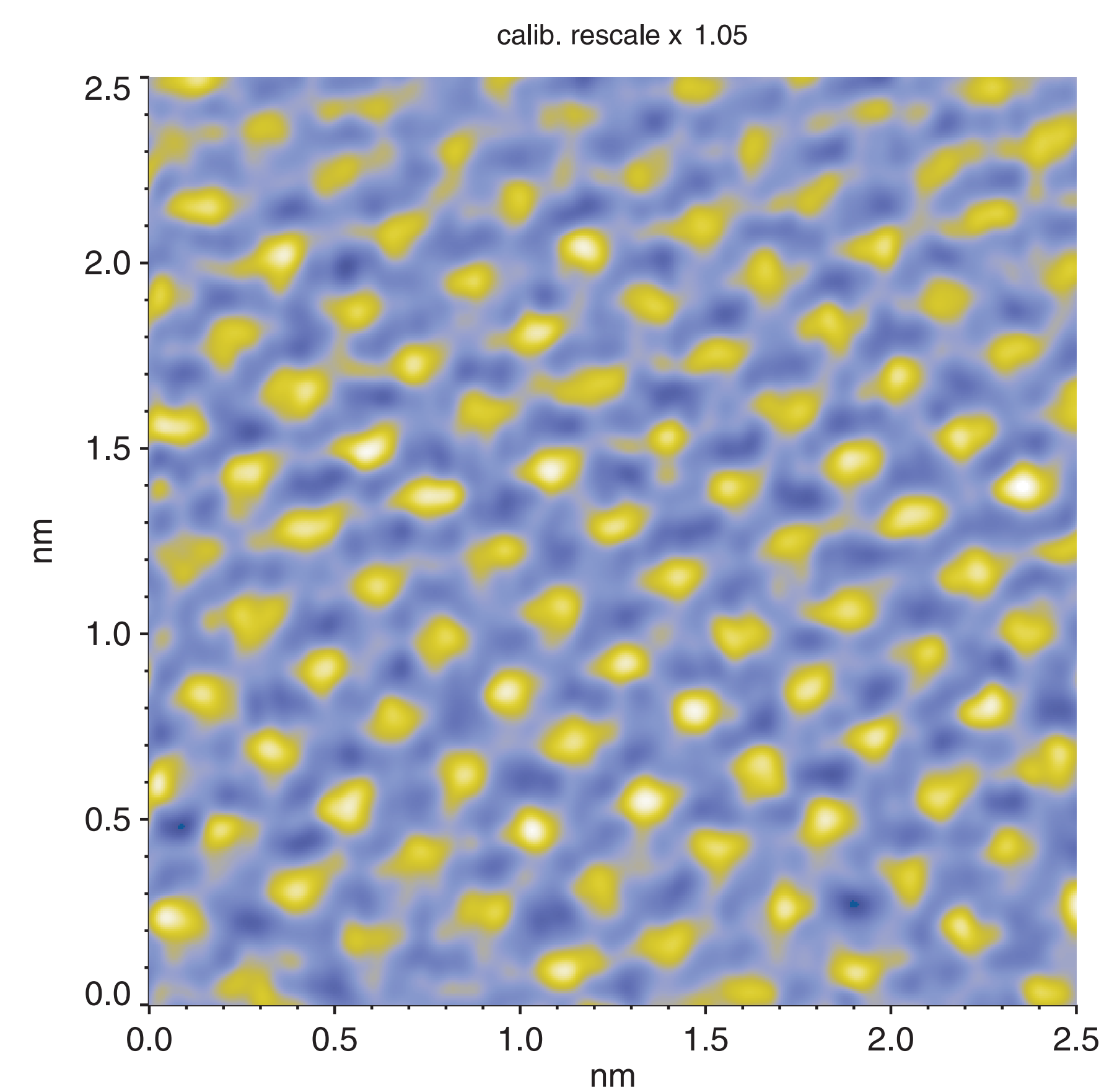
Spektroskopische STM Rasterabbildung auf **HOPG**  
 $I_T = 200 \text{ pA}$   $U_T = 4 \text{ mV}$  (Rohdaten)



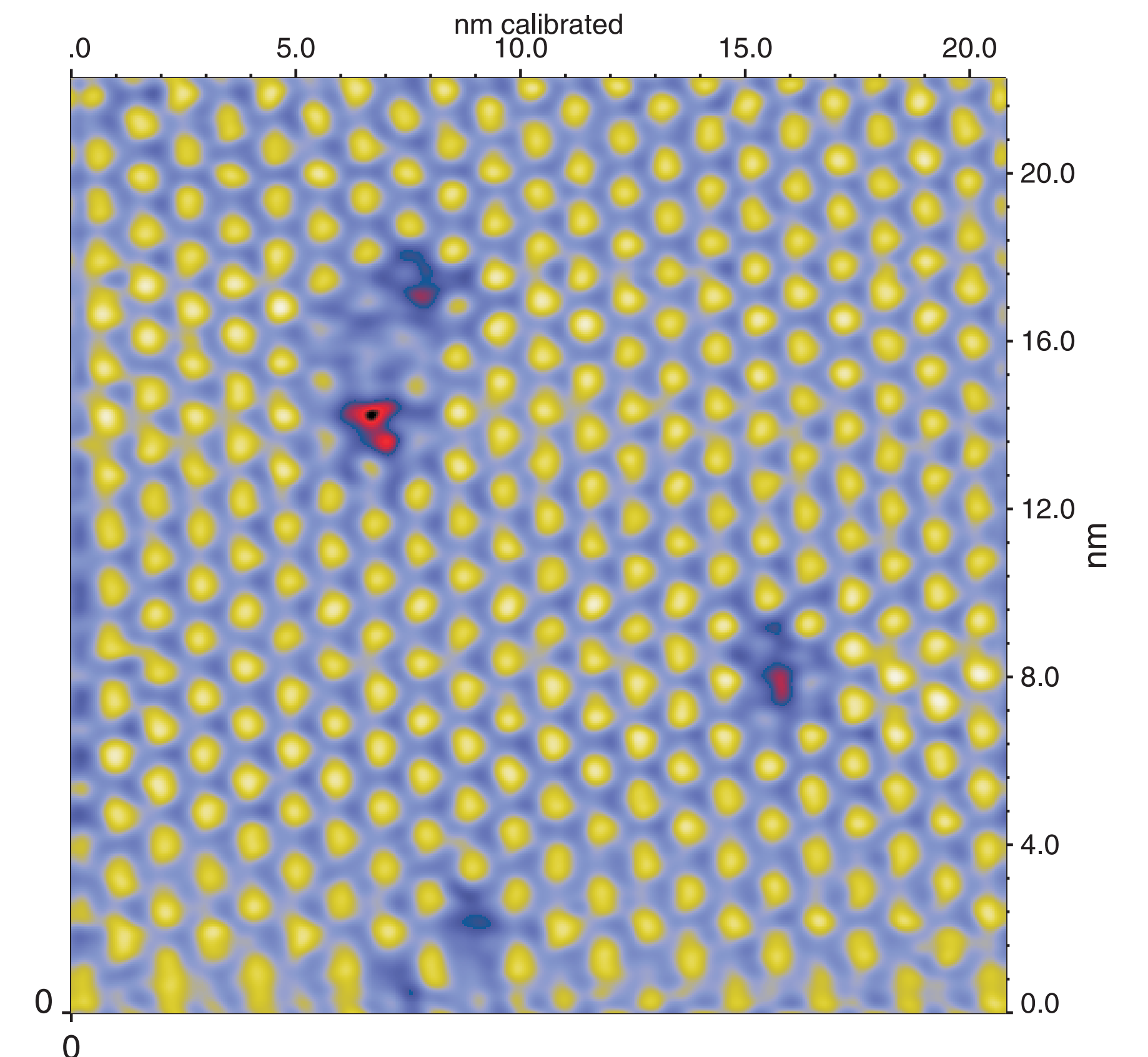
**HOPG**  
 $I_T = 590 \text{ pA}$   $U_T = 4 \text{ mV}$  (FT gefiltert, kontrastverstärkt)



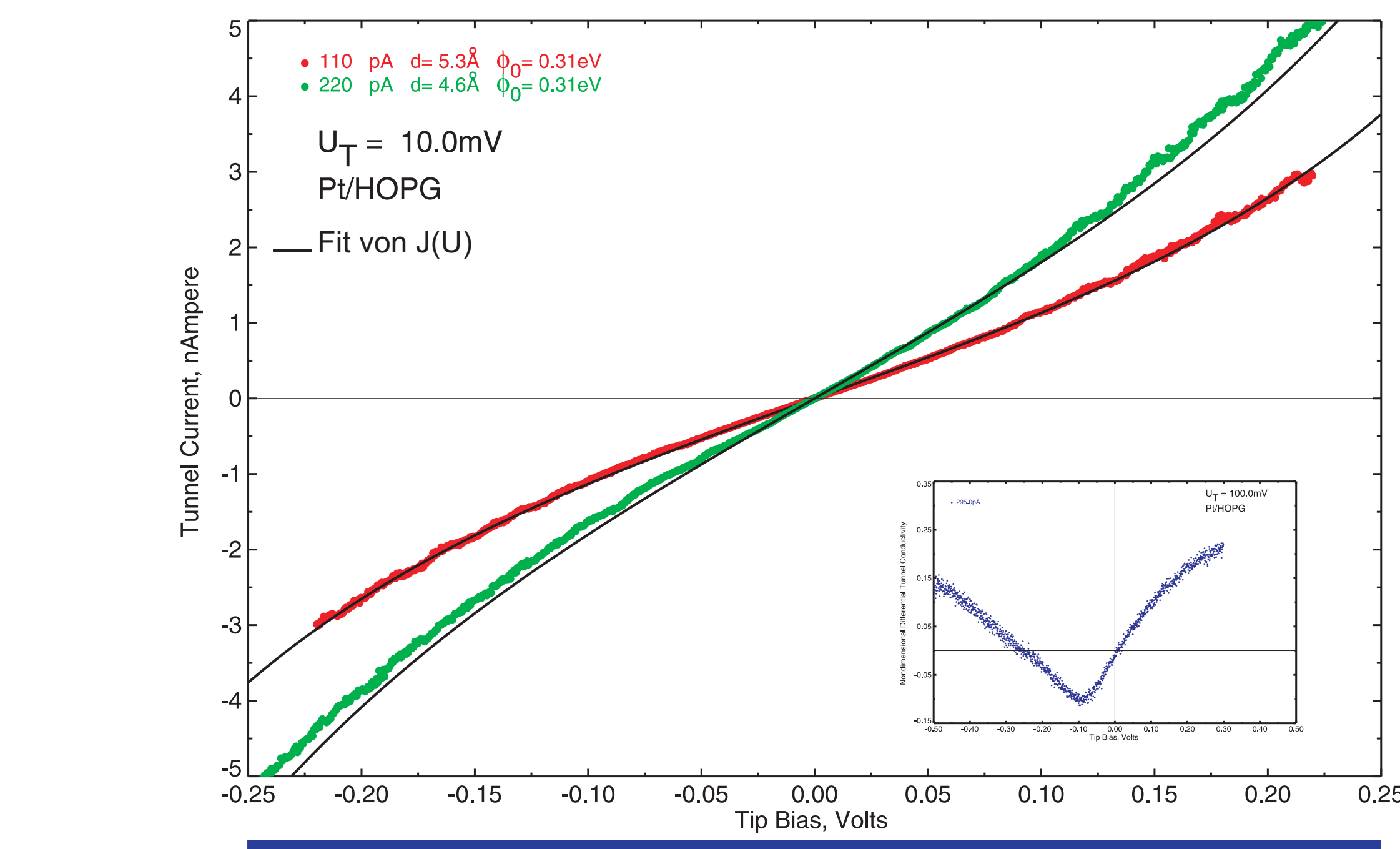
**HOPG**  
 $I_T = 150 \text{ pA}$   $U_T = 2 \text{ mV}$  (FT gefiltert, Byte-skaliert)



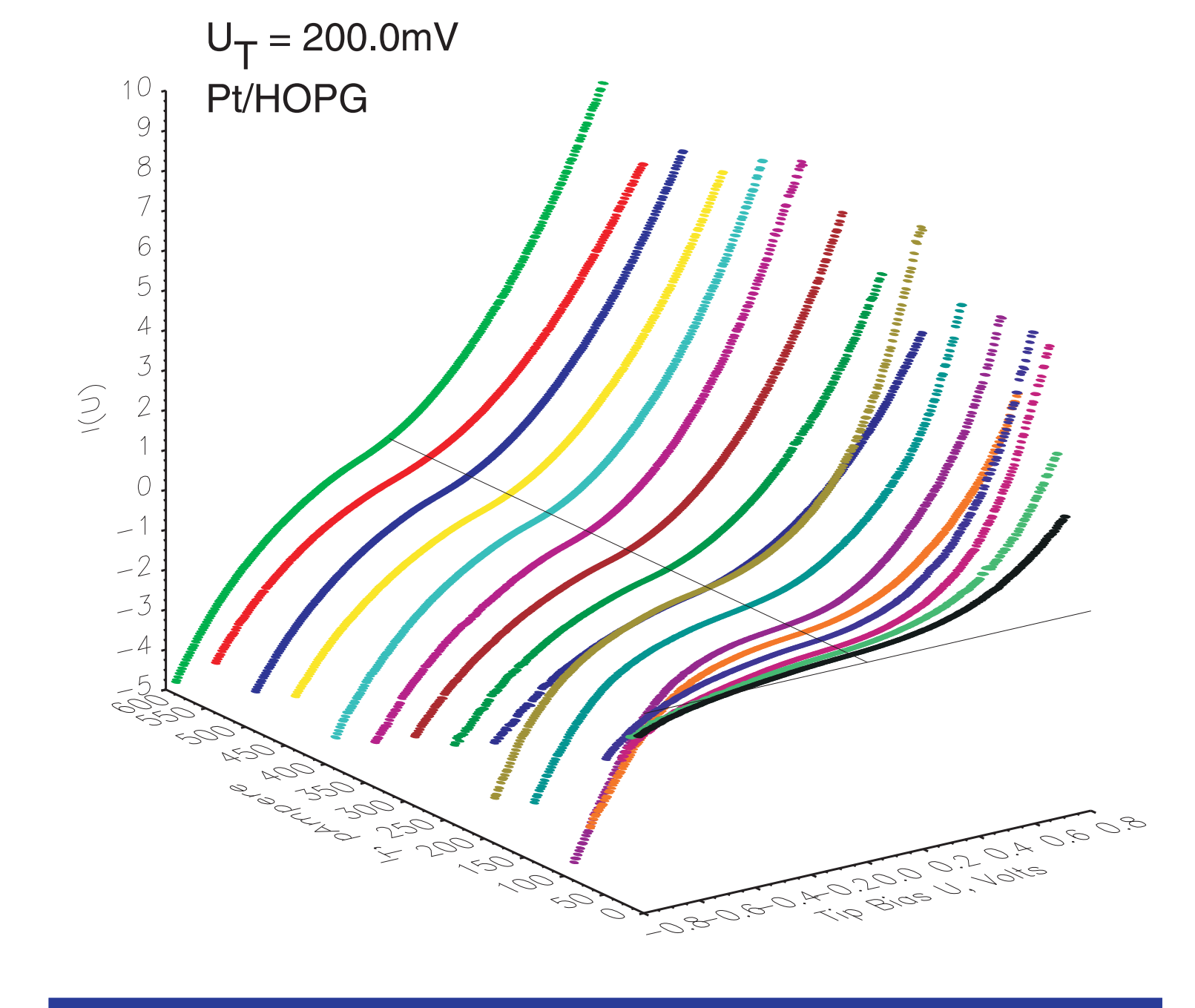
Spektroskopische STM Rasterabbildung auf **MoS<sub>2</sub>**  
 $I_T = 160 \text{ pA}$   $U_T = 990 \text{ mV}$  (FT gefiltert, kontrastverstärkt)



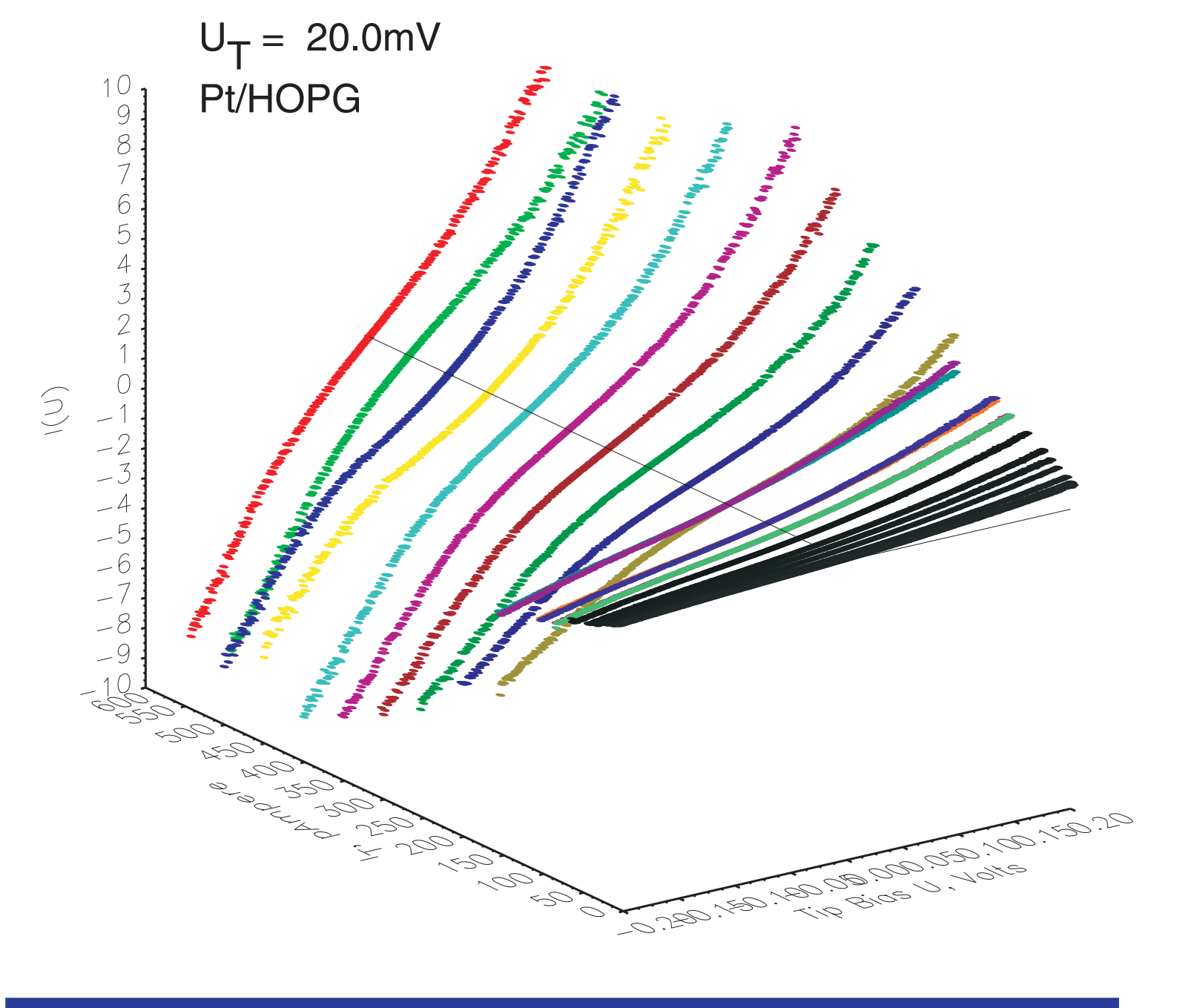
Spektroskopische STM Rasterabbildung auf **TaS<sub>2</sub>**  
 $I_T = 110 \text{ pA}$   $U_T = 50 \text{ mV}$  (FT gefiltert, kontrastverstärkt)



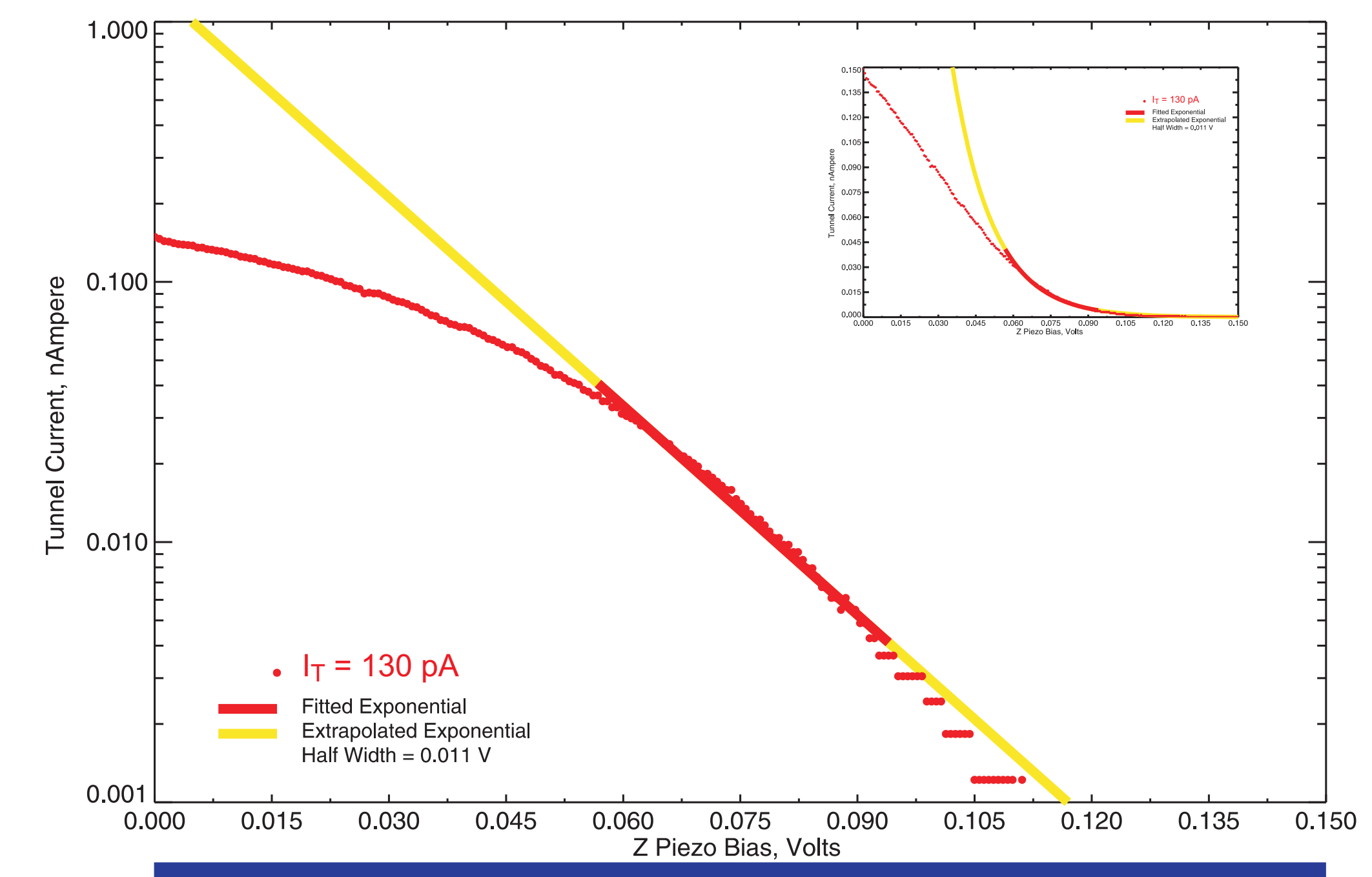
**I(U)-Spektroskopie an HOPG bei verschiedenen Tunnelströmen**  
 Hinweis: Reduzierte Differentielle Tunnelleitfähigkeit gemessen mit Lock-In Modulationstechnik. Die gefilterten Kurven wurden nach Anpassung der Parameter mit dem direkten Tunnelmodell gerechnet (s.u.)



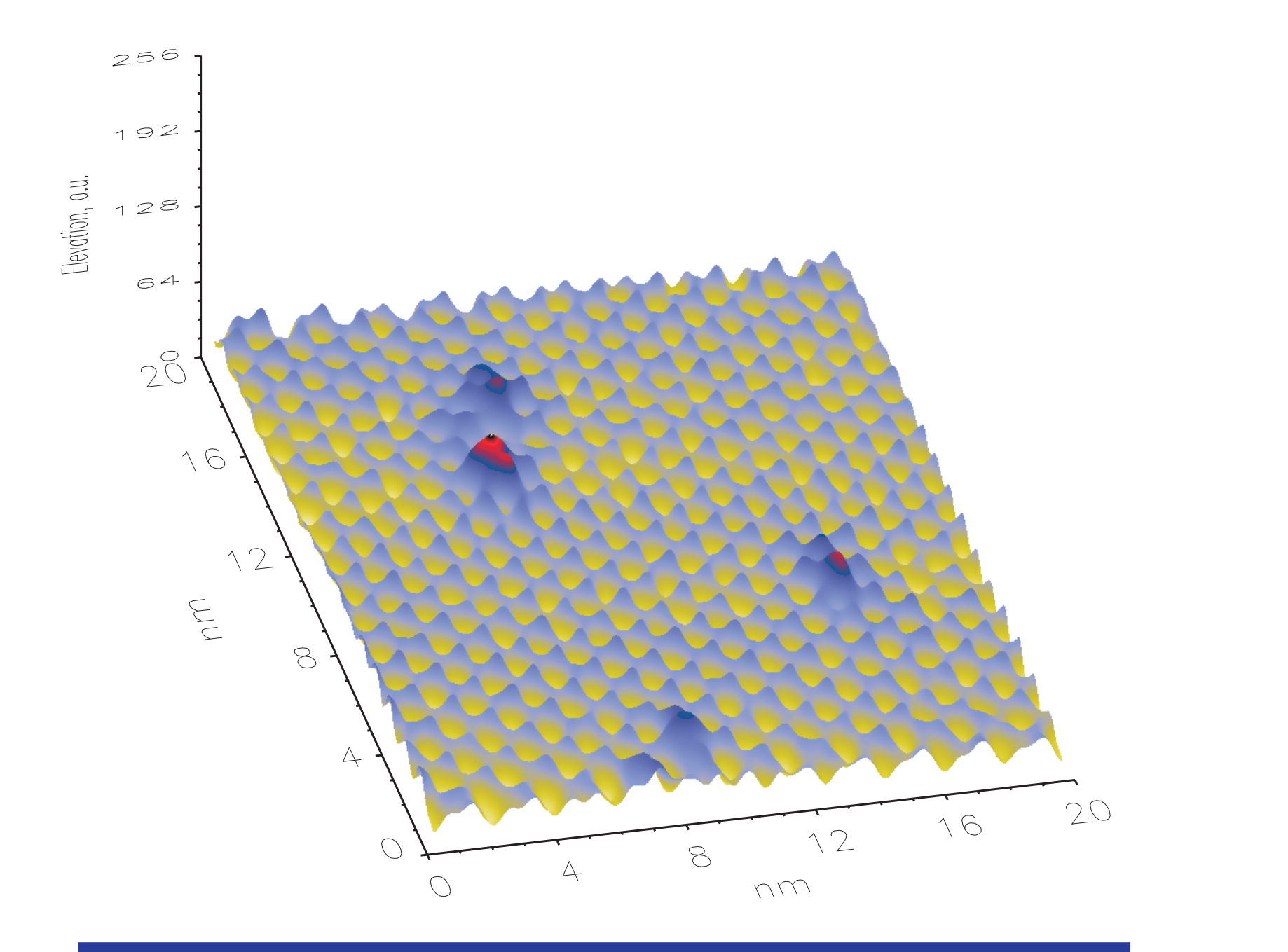
**I(U) Spektroskopie bei verschiedenen Tunnelströmen**  
 Jede (U) Kurve wurde bei konstanten Tunnelparametern I<sub>T</sub>, U<sub>T</sub> gemessen



**I(U) Spektroskopie bei verschiedenen Tunnelströmen**  
 Jede (U) Kurve wurde bei konstanten Tunnelparametern I<sub>T</sub>, U<sub>T</sub> gemessen



**I(Z)-Spektroskopie bei I<sub>T</sub> = 288 pA**  
 Die I(Z) Kurve weicht infolge elastischer W.W. stark von der Exponentialform ab



**Pseudo 3D-Darstellung der 2D-STM Stromfläche**  
 Die Tunnelstromlinien sind (falschlicherweise) durch Elevation

**I(U) und I(Z) Spektroskopie von Tunnelelektronen**

Unter der Annahme, daß die Elektronen im System 1 (mit der effektiven Masse  $m_1$ ) von den Elektronen im System 2 (mit der effektiven Masse  $m_2$ ) im eindimensionalen Fall durch eine rechteckige Potentialbarriere der Form

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < -a \\ V_0 & -a \leq x \leq a \\ 0 & x > a \end{cases}$$

getrennt sind,

Rechteckige Potentialbarriere: Wellenfunktion  $\psi_1(x)$  für ein Teilchen der effektiven Masse  $m_1$  mit Wellenvektor  $k_1$  für  $x < -a$  auf der linken Seite,  $\psi_2(x)$  mit Wellenvektor  $k_2$  für  $x > a$  auf der rechten Seite der Potentialbarriere (die eingangsseitig reflektierte Welle ist nicht dargestellt).

läßt sich die stationäre Schrödinger-Gleichung für ein Einzelelektron, dessen Energie  $E$  sowohl  $E < V_0$  (Tunnelfall) als auch  $E > V_0$  (freies Teilchen) angenommen wird, in den einzelnen Teilabschnitten schreiben:

Aus der Lösung dieses Gleichungssystems erhält man für den Durchgangskoeffizienten  $D_{12}$  als Verhältnis von Transmissionsstromdichte  $j_2$  zu Einfallstromdichte  $j_{inc}$

$$D_{12}(E) = \frac{4 \frac{\hbar^2 k_1 k_2}{m_1^2 m_2^2}}{\frac{\hbar^2 k_1^2}{m_1^2} + \frac{\hbar^2 k_2^2}{m_2^2} + \left(\frac{\hbar^2 k_1^2}{m_1^2} + \frac{\hbar^2 k_2^2}{m_2^2}\right) \sin^2(2qa)}$$

$$D_{12}(E) = \frac{4 \frac{\hbar^2 k_1 k_2}{m_1^2 m_2^2}}{\frac{\hbar^2 k_1^2}{m_1^2} + \frac{\hbar^2 k_2^2}{m_2^2} + \left(\frac{\hbar^2 k_1^2}{m_1^2} + \frac{\hbar^2 k_2^2}{m_2^2}\right) \sin^2(2qa)}$$

dessen Abhängigkeit von der Energie des Elektrons auf der folgenden Abbildung dargestellt ist:

Durchgangskoeffizient der Rechteck-Potentialbarriere: Darstellung des Durchgangskoeffizienten  $D_{12}$  nach in Abhängigkeit der Energie  $E$  des Teilchens, sowohl für  $m_1 = m_2$ , ( $m_1 = m_2$ ) als auch für  $m_1 < m_2$  ( $m_1 = 1.2 m_0$ ,  $m_2 = 3.5 m_0$ ),  $V_0 = 1.0 \text{ eV}$ . Die Abbildungen sind für die Barrierenbreiten  $d = 10, 1 \text{ \AA}$  dargestellt.

Da sich die Elektronenniveaus zweier Metallsysteme, die in elektrischem Kontakt stehen, so angleichen, daß die Fermienergien gleich sind, fließt nur dann ein Elektronenstrom von Metall 1 nach Metall 2, wenn zusätzlich eine äußere Spannung  $U$  angelegt wird:

Energieniveaus zweier Metalle bei angelegter äußerer Spannung für  $eU > 0$ , schraffiert dargestellt sind die besetzten Niveaus bei  $T = 0$ . Aufgrund der angelegten Spannung  $U$  erniedrigt sich die Potentialbarriere auf den mittleren Wert  $V_0 = V_0 - \frac{eU}{2}$ .

Da die Metallelektronen der Fermi-Statistik  $f(E)$  unterliegen, tragen zum Tunnelstrom Elektronen aus vielen Energieniveaus bei, sodaß zur Berechnung des Gesamtstroms  $J(U)$  über ein entsprechendes Energieintervall integriert werden muß:

$$J(U) = \frac{2eV_0}{h} \int dE_x D(E_x, U) \int dE_f [f(E) - f(E + eU)]$$

Hierin bedeuten  $E_x$  der longitudinale und  $E_f$  der zur Tunnelrichtung  $x$  transversale Anteil an der Gesamtenergie  $E = E_x + E_f$  und  $\mu_x$  die transversale Zustandsdichte.

Zur Ausführung des Integrals in Glg.(4) werden vereinfachend nur Elektronenniveaus berücksichtigt, die bei  $T = 0$  besetzt sind, d.h. zwischen  $E = E_f - eU$  und  $E_f$  liegen, wobei dann  $f(E) = 1$ .

Da die bei der Berechnung des Tunnelstroms in dem Durchgangskoeffizienten auftretende Potentialbarriere  $V_0$  in Wirklichkeit nicht konstant ist, sondern sowohl durch die angelegte äußere Spannung  $U$  als auch durch die in den Oberflächen induzierten Bildpotentiale im Tunnelgap stark von  $x$  abhängt, wird dies mit Hilfe der sogenannten **WKB Näherung** berücksichtigt, indem der Durchgangskoeffizienten bei gleichen Massen  $m_1 = m_2 = m_0$  wie folgt approximiert wird:

$$D(E_x, U) = e^{-2\beta} \sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2} \sqrt{V_0 - \frac{eU}{2} - E_x}} d$$

wobei  $\beta$  eine aus dem WKB Verfahren stammende Korrekturfunktion ist. Damit berechnet sich der Tunnelelektronenstrom in Approximation:

$$J(U) = -\frac{2eV_0\Phi_0}{h} \left\{ \frac{eU}{\Phi_0} \frac{1}{\kappa_0 d} \left( \sqrt{1 + \frac{E_f - eU}{\Phi_0}} + \frac{1}{2\kappa_0 d} \right) e^{-2\kappa_0 d \sqrt{1 + \frac{E_f - eU}{\Phi_0}}} + \frac{1}{(\kappa_0 d)^2} \left( 1 + \frac{eU}{2\Phi_0} + \frac{3}{2(\kappa_0 d)^2} \sqrt{1 + \frac{eU}{2\Phi_0}} + \frac{3}{4(\kappa_0 d)^2} \right) e^{-2\kappa_0 d \sqrt{1 + \frac{eU}{2\Phi_0}}} - \frac{1}{(\kappa_0 d)^2} \left( 1 - \frac{eU}{2\Phi_0} + \frac{3}{2(\kappa_0 d)^2} \sqrt{1 - \frac{eU}{2\Phi_0}} + \frac{3}{4(\kappa_0 d)^2} \right) e^{-2\kappa_0 d \sqrt{1 - \frac{eU}{2\Phi_0}}} \right\}$$

Hierbei bedeutet  $\Phi_0 = V_0 - E_f$  die Austrittsarbeit und  $d = 2a$  die Breite des Tunnelgaps. Diese Form des Tunnelstroms  $J(U)$  kann unmittelbar zum Fit der Daten verwendet werden.

Berechnetes Tunnelstromspektrum  $I(U)$  als Funktion der Tunnelspannung  $U$ . Es wurden die für Metallsysteme typischen Parameter verwendet:  $\Phi_0 = 2\text{eV}$ ,  $E_f = 5.53\text{eV}$ ,  $d = 8\text{\AA}$ . Der nichtlineare Verlauf der Kennlinie ist deutlich zu erkennen.

Eine anschauliche Form des Tunnelstromes erhält man nur für große Abstände  $\kappa_0 d \gg 1$ , große Fermienergie  $\frac{E_f}{\Phi_0} > 1$  und nach einer Reihenentwicklung bezüglich  $\frac{eU}{\Phi_0}$ :

$$J(U) \approx \frac{4eV_0\Phi_0^2}{h} \left( \frac{1}{\kappa_0 d} \left( \frac{eU}{\Phi_0} \right) + \frac{\kappa_0 d}{96} \left( \frac{eU}{\Phi_0} \right)^3 \right) e^{-\kappa_0 d}$$

Berechneter Tunnelstrom  $I(d)$  als Funktion der Tunnelbarrierebreite  $d$ . Es wurden die für Metallsysteme typischen Parameter verwendet:  $\Phi_0 = 5.3\text{eV}$ ,  $E_f = 5.53\text{eV}$ ,  $U = 1.0\text{V}$ .

Die approximative Form des Tunnelstromes gibt in minimaler Form wieder, daß der nichtlineare Anteil umso größer ist, je größer der Tunnelabstand  $d$  und je kleiner die Tunnelbarriere  $\Phi_0$  ist. Außerdem wird die exponentielle Abstandsabhängigkeit des Tunnelstromes korrekt dargestellt.