

# Rastertunnelmikroskopie

Dr. Robin Ohmann  
28. September 2018

Versuchsanleitung: Fortgeschrittenenpraktikum  
Universität Siegen



Titelbild: [www.nanosurf.com](http://www.nanosurf.com)

Versuchsdurchführung in Raum ENC B-0132  
AG Experimentelle Nanophysik  
Prof. Carsten Busse

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>2</b>
<b>2</b>	<b>Rastertunnelmikroskopie</b>	<b>3</b>
2.1	Tunneleffekt . . . . .	4
2.2	Tunnelstrom . . . . .	6
2.3	Lokale Zustandsdichte . . . . .	8
2.4	Rastertunnelspektroskopie . . . . .	8
<b>3</b>	<b>Experimenteller Aufbau</b>	<b>10</b>
<b>4</b>	<b>Experimentelle Durchführung</b>	<b>11</b>
4.1	Spitzenpräparation . . . . .	11
4.2	Probe einlegen . . . . .	12
4.3	Annähern . . . . .	12
4.4	Scannen . . . . .	14
4.5	Bildbearbeitung und Bildanalyse . . . . .	16
<b>5</b>	<b>Aufgaben</b>	<b>18</b>
5.1	Pflicht . . . . .	18
5.1.1	Hochorientierter pyrolytischer Graphit (HOPG) . . . . .	18
5.1.2	Au(111) . . . . .	19
5.1.3	Potenzialbarrierenhöhe . . . . .	19
5.1.4	2D Materialien . . . . .	20
5.2	Wahl . . . . .	20
5.2.1	Selbstorganisierte molekulare Monolagen . . . . .	20
5.2.2	Materialwahl Spitze . . . . .	20
5.2.3	PID Regelkreis . . . . .	20
5.2.4	Rastertunnelspektroskopie . . . . .	20
5.2.5	Rauschanalyse . . . . .	21
5.2.6	Auslesen der Daten . . . . .	21
<b>6</b>	<b>Anforderungen an das Protokoll</b>	<b>22</b>
<b>A</b>	<b>NID Dateistruktur</b>	<b>23</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>30</b>

# Kapitel 1

## Einleitung

In diesem Versuch werden Sie die Möglichkeit haben mittels eines Rastertunnelmikroskops (engl. scanning tunneling microscope (STM)) Atome sichtbar zu machen. Für die Erfindung des STMs erhielten Binnig und Rohrer 1986 den Nobelpreis für Physik [1]. Bei dieser Methode fährt eine elektrisch leitende Spitze in sehr geringem Abstand über eine leitfähige Oberfläche und es kann dabei die Topographie atomar aufgelöst werden. Zusätzlich eignet es sich zum Untersuchen der elektronischen Eigenschaften der Probe, wie zum Beispiel der lokalen Zustandsdichte und ermöglicht auch die Manipulation einzelner Atome und Moleküle, welche auf der Oberfläche adsorbiert sind. Einige Beispiele aus der Literatur sind in Abbildung 1.1 gezeigt. Neben der Bedienung des Mikroskops und der Präparation der Spitze und der Probe werden Grundlagen der Quantenmechanik, Oberflächenphysik, Bildbearbeitung und Datenverarbeitung vermittelt.

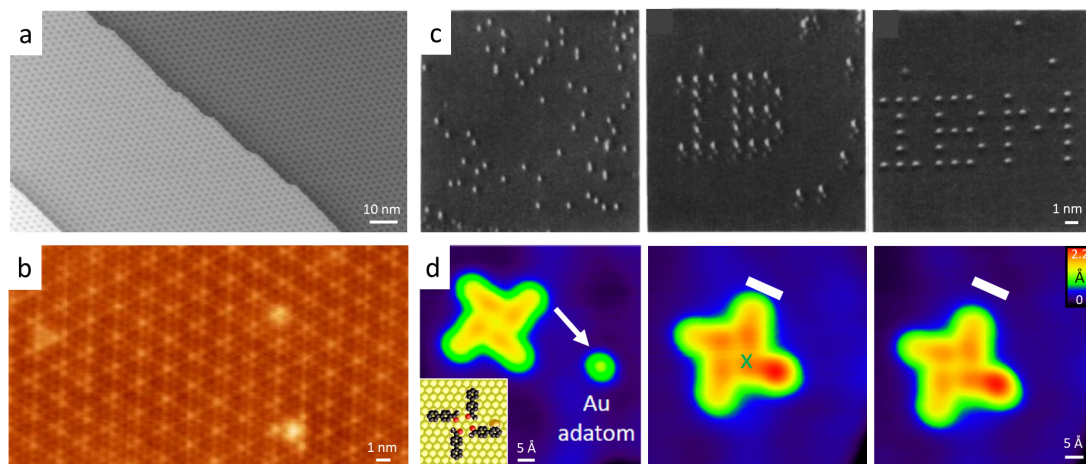


Abbildung 1.1: a) Graphen auf Ir(111), Spannung  $U=0,1$  V; Strom  $I=30$  nA [2], b) gespaltenen  $\text{NeS}_2$  Kristall (zeigt Atome und Ladungsdichtewellen), c) Manipulation von einzelnen Xe Atomen auf Ni(110).  $U= 0,01$  V;  $I= 1$  nA [3], d) Aufladen und Transport von einem Atom mit einem supramolekularen Transporter.  $U=0,1$  V;  $I=0,1$  nA [4]

## Kapitel 2

# Rastertunnelmikroskopie

Bei der Rastertunnelmikroskopie wird eine metallische Spitze über eine Oberfläche mittels Piezoelementen pikometergenau entlangbewegt (siehe Abbildung 2.1 a). Dabei wird eine Spannung zwischen Spitze und Probe angelegt und bei einem Abstand der Spitze von einigen Ångström über der Oberfläche ein Strom gemessen, welcher auf Grund des quantenmechanischen Tunneleffekts fließt. Das Abrastern der Probe kann entweder im Konstante-Höhe Modus oder im Konstanter-Strom Modus erfolgen. Beim Konstante-Höhe Modus wird der zwischen Spitze und Probe fließende Strom, Tunnelstrom, während der Bewegung der Spitze in einer Ebene direkt gemessen. Beim gebräuchlicheren Konstanter-Strom Modus (siehe Abbildung 2.1 b) wird der Tunnelstrom, durch Anpassung des Abstands der Spitze zur Oberfläche mittels eines Regelkreises, konstant gehalten. Man erhält damit ein Höhenprofil der Probe. Die hohe Auflösung bis in den atomaren Bereich wird einerseits durch die exponentielle Abhängigkeit des Tunnelstromes vom Abstand Spitze und Probe ermöglicht (bei Änderung des Abstands um 1 Ångström ändert sich der Strom um eine Größenordnung) und andererseits durch die präzise Bewegung der Spitze mittels Piezoelementen.

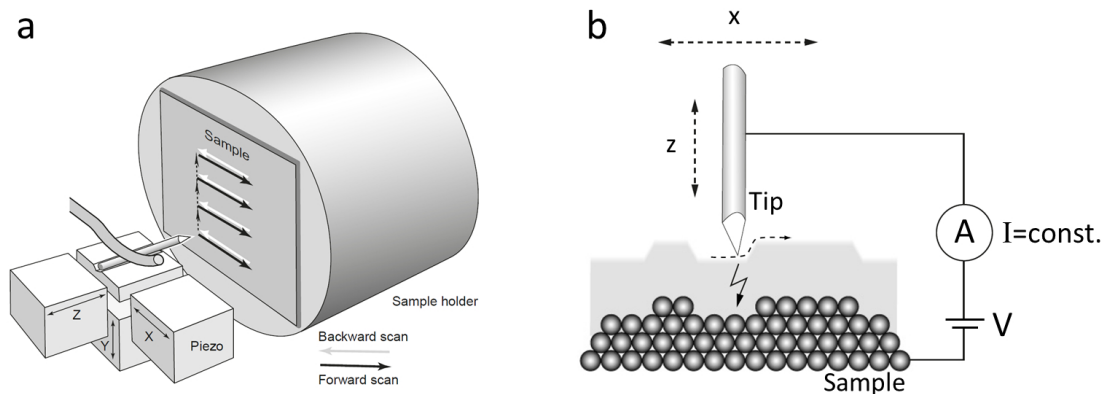


Abbildung 2.1: a) Rastertunnelmikroskop (schematische Darstellung) b) Konstanter-Strom Modus mit eingezeichnetem Schaltkreis [5].

Piezoelemente ändern durch Anlegen einer Spannung ihre Form. Diese Formänderung kann pikometergenau gesteuert werden. Im Folgenden werden die theoretischen Grundlagen und weitere Anwendungsbereiche wie zum Beispiel die Rastertunnelspektroskopie näher erläutert.

## 2.1 Tunneleffekt

Der Tunneleffekt ist ein quantenmechanisches Phänomen bei dem ein Teilchen eine Potenzialbarriere durchqueren (tunneln) kann, welche höher als die Energie des Teilchens ist. Dieses Verhalten wäre mittels der klassischen Mechanik nicht erklärbar.

Allgemein gilt, dass die Energie eine Erhaltungsgröße ist:

$$E_{\text{kin}} + E_{\text{pot}} = E = \text{const}$$

In der klassischen Mechanik ergibt sich daraus die Bewegungsgleichung eines Teilchens in einem eindimensionalen Potenzial  $V(z)$ :

$$\frac{1}{2}mv^2 + V(z) = \frac{p^2}{2m} + V(z) = E$$

Stellt man dies nach dem Impuls  $p$  um

$$p = \sqrt{2m(E - V(z))}$$

so sieht man, dass es nur Lösungen geben kann, sofern die Energie des Teilchens größer als die der Potenzialbarriere ist  $E \geq V(z)$ .

In der Quantenmechanik gilt der Welle-Teilchen-Dualismus, bei dem Teilchen auch als Welle betrachtet werden können. Analog zur Bewegungsgleichung lautet die Wellengleichung, häufig als Schrödingergleichung bezeichnet, für den zeitunabhängigen eindimensionalen Fall wie folgt:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(z)}{dz^2} + V(z)\psi(z) = E\psi(z)$$

Durch Umformen erhält man:

$$\frac{d^2\psi(z)}{dz^2} + \frac{2m(E - V(z))}{\hbar^2}\psi(z) = 0$$

Mit dem Exponentialansatz  $\psi(z) = Ce^{\lambda z}$  und  $V(z) = V = \text{const}$  erhält man mögliche Lösungen für diese Differenzialgleichung 2. Ordnung:

$$\lambda_{1,2}(V) = \pm \sqrt{-\frac{2m}{\hbar^2}(E - V)}$$

Die Koeffizienten  $\lambda_{1,2}$  können reelle sowie imaginäre Werte annehmen. Das heißt, dass die Energie des Teilchens größer gleich oder auch kleiner als die Energie des Potentials sein kann. Die allgemeine Lösung ergibt sich aus der Linearkombination der Teillösungen:

$$\psi(z) = A \cdot e^{\lambda_1 z} + B \cdot e^{\lambda_2 z}$$

Jetzt sind drei Bereiche zu unterscheiden siehe Skizze (Abbildung 2.2):

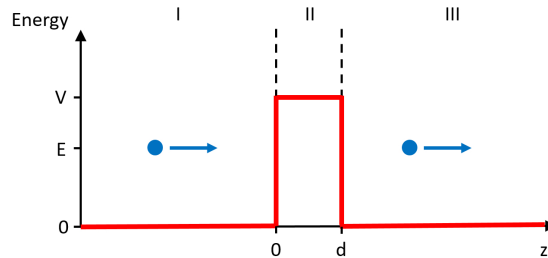


Abbildung 2.2: Schematische Darstellung des Tunneffekts von einem Teilchen durch ein Kastenpotential

Im Bereich (I) und Bereich (III) ist die kinetische Energie des Teilchens größer als das Potential ( $E > 0$ ) und im Bereich (II) geringer ( $E < V$ ). Die Lösungen für alle drei Bereiche erhält man separat mit dem Exponentialansatz.

$$\begin{aligned}
 I. \quad V = 0 \quad \psi_I(z) &= \underbrace{A \cdot e^{ik_I z}}_{\text{einfallende Welle}} + \underbrace{B \cdot e^{-ik_I z}}_{\text{reflektierte Welle}} & \text{mit } k_I &= \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \\
 II. \quad V = V_0 \quad \psi_{II}(z) &= \underbrace{C \cdot e^{k_{II} z} + D \cdot e^{-k_{II} z}}_{\text{zerfallende Wellenfunktion in der Barriere}} & \text{mit } k_{II} &= \frac{\sqrt{-2m(E - V_0)}}{\hbar} \\
 III. \quad V = 0 \quad \psi_{III}(z) &= \underbrace{F \cdot e^{ik_{III} z}}_{\text{transmittierte Welle}} & \text{mit } k_{III} = k_I &= \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}
 \end{aligned}$$

Die Vorfaktoren ergeben sich unter Betrachtung der Stetigkeitsbedingungen

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0); \psi_{II}(d) = \psi_{III}(d); \frac{d\psi_I(0)}{dz} = \frac{d\psi_{II}(0)}{dz}; \frac{d\psi_{II}(d)}{dz} = \frac{d\psi_{III}(d)}{dz}$$

Für unsere Betrachtungsweise relevant ist die Transmissionswahrscheinlichkeit  $T$ . Diese ist definiert als der transmittierte Teilchenfluss  $S_{\text{trans}}$  geteilt durch den einfallenden Teilchenfluss  $S_{\text{ein}}$  und ist ein Maß für die Stärke des Tunneffekts. Der Teilchenfluss ist gegeben durch  $S = |\psi(z)|^2 v$  d.h. als Produkt von Wahrscheinlichkeitsdichte  $|\psi(z)|^2$  und Teilchengeschwindigkeit  $v$ . Es gilt somit:

$$T = \frac{S_{\text{trans}}}{S_{\text{ein}}} = \frac{|\psi_{III}(z)|^2 v_{III}}{|\psi_{I,\text{einfallend}}(z)|^2 v_I} = \frac{FF^*}{AA^*}$$

Die Geschwindigkeiten  $v_I$  vor und  $v_{III}$  nach der Tunnelbarriere sind gleich und lassen sich somit wegekürzen, da wir hier elastisches tunneln betrachten bei dem die kinetische Energie des Teilchens konstant bleibt. Falls die Geschwindigkeit des einfallenden Teilchens 0 ist, so ist das Verhalten nicht definiert, da man durch 0 teilen müsste. Anschaulich bedeutet das, dass ruhende Teilchen nicht plötzlich irgendwo anders auftauchen können. Für kleine Energien ( $E \ll V_0$ ) und breite Barrieren ( $k_{II}d \gg 1$ ) ergibt sich die Transmissionswahrscheinlichkeit näherungsweise zu:

$$T \approx \frac{16}{3 + \frac{V_0}{E}} e^{-\frac{2\sqrt{2m(V_0-E)}d}{\hbar}}$$

Der Tunneleffekt gilt für alle Teilchen, das heisst neben Elektronen können auch Protonen, Neutronen oder beliebige andere Teilchen durch eine Potenzialbarriere tunneln wie zum Beispiel beim Alpha-Zerfall. Es gibt auch eine von Null verschiedene Wahrscheinlichkeit, dass man selbst durch eine Wand tunneln kann. Diese Wahrscheinlichkeit ist aber sehr gering und hat keine praktische Bedeutung. Also bitte nicht 100 mal gegen die Wand rennen. ;)

## 2.2 Tunnelstrom

Bei der Rastertunnelmikroskopie legt man eine Spannung zwischen Spitze und Probe an, welche typischerweise im Bereich von  $\pm 10V$  liegt. Elektronen durchtunneln die Potenzialbarriere, deren Energiehöhe durch die Austrittsarbeit von Spitze und Probe gegeben ist. Die Austrittsarbeit ist die Energie die normalerweise aufgewendet werden muss um ein Elektron aus dem Festkörper zu lösen und ist typischerweise einige Elektronenvolt (eV) groß. Der aufgrund des Tunneleffekts fließende Strom wird als Tunnelstrom bezeichnet und kann wie folgt berechnet werden:

Betrachtet man der Einfachheit halber zunächst zwei planare Elektroden, welche durch ein isolierendes Material getrennt sind so ergibt sich mittels der goldenen Regel von Fermi, welche die Wahrscheinlichkeit eines Elektrons beschreibt sich von einer Seite zur anderen Seite zu bewegen, folgendes für den Strom:

$$I(V, T) = 2e \sum_{\mu, \nu} |M_{\mu\nu}|^2 \delta(E_\mu - eV - E_\nu) \cdot (f(E_\nu - eV, T)[1 - f(E_\nu, T)] - f(E_\nu, T)[1 - f(E_\mu - eV, T)])$$

wobei die Summation über alle Zustände  $\mu, \nu$  beider Elektroden erfolgt und die temperaturabhängige Fermi-Dirac-Verteilung mit dem Übergangsmatrixelement

$$M_{\mu\nu} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \int dS \cdot (\psi_\nu^* \nabla \psi_\mu - \psi_\mu \nabla \psi_\nu^*).$$

multipliziert wird. Tersoff und Hamann haben dieses Model auf die spezielle Geometrie beim Rastertunnelmikroskop angewendet [6]. Dabei wird die Spitze als sphärisch symmetrisch angenommen und eine s-Wellenfunktion wird verwendet um die Spitze zu



beschreiben. Man erhält dann für den Tunnelstrom:

$$I(V, T, x, y, z) \propto \int_{-\infty}^{\infty} dE \rho_t(E - eV) \rho_s(E, x, y) \tau(E, V, z) [f(E - eV, T) - f(E, T)]$$

wobei  $\rho_t$  die Zustandsdichte der Spitze,  $\rho_s$  die ortsabhängige Zustandsdichte der Probe (lokale Zustandsdichte) und  $z$  der Abstand zwischen Spitze und Probe ist. Der Tunneltransmissionsfaktor  $\tau$  ist, bei Vernachlässigung der parallelen Komponente der Elektronenmomente in  $M_{\mu\nu}$  gegeben durch:

$$\tau(E, V, z) = \exp\left(-\frac{2\sqrt{m_e(\phi_t + \phi_s - 2E + eV)}z}{\hbar}\right)$$

wobei  $\phi_t$  und  $\phi_s$  die Austrittsarbeiten von Spitze und Probe sind. Für kleine Spannungen kann die Abhängigkeit des Faktors von der Spannung und der Energie vernachlässigt werden und vor das Integral gezogen werden. Zusätzlich nähert sich im Grenzfall der tiefen Temperaturen die Fermi-Dirac Verteilung einer Stufenfunktion an und man erhält:

$$I(V, x, y, z) \propto \exp\left(-\frac{2\sqrt{m_e(\phi_t + \phi_s)}z}{\hbar}\right) \cdot \int_0^{eV} dE \rho_t(E - eV) \rho_s(E, x, y) \quad (2.1)$$

Der erste Term beschreibt die exponentielle Abhängigkeit des Tunnelstroms vom Abstand Spitze zu Probe. Der zweite Term ist die Faltung von der Zustandsdichte der Spitze mit der Zustandsdichte der Probe. Legt man eine positive Spannung an die Probe an so tunneln Elektronen von besetzten Zuständen der Spitze in unbesetzte Zustände der Probe. Für negative Spannungen ist das Verhalten umgekehrt und es tunneln Elektronen von besetzten Zuständen der Probe in unbesetzte Zustände der Spitze (siehe Abbildung 2.3).

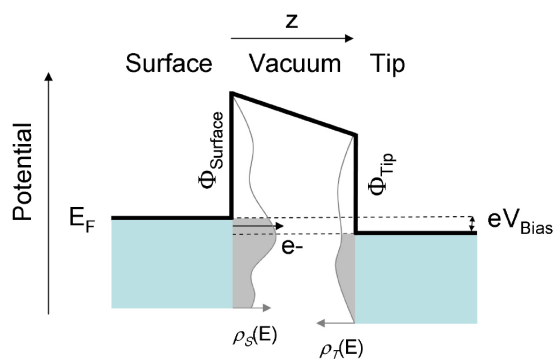


Abbildung 2.3: Energieniveaudiagramm von Probe und Spitze für negative Spannung.

## 2.3 Lokale Zustandsdichte

Die lokale Zustandsdichte (engl. local density of states (LDOS)) gibt an wie viele Zustände pro Energieintervall  $dE$  an einem bestimmten Ort vorhanden sind. Diese Zustände können entweder besetzt oder unbesetzt sein. Am absoluten Nullpunkt sind alle Zustände bis zur Fermi-Energie besetzt, alle Zustände höherer Energie sind unbesetzt. Mit zunehmender Temperatur können Elektronen auch Zustände oberhalb der Fermi-Energie besetzen, dies führt dann zu unbesetzten Zuständen unterhalb der Fermi-Energie. Bei der Rastertunnelmikroskopie liegt die Fermi-Energie immer bei der Spannung 0 V. Allgemein gilt für die Zustandsdichte

$$D(E) = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{E(\mathbf{k})=\text{const}} \frac{dS_E}{\nabla_{\mathbf{k}}E(\mathbf{k})}$$

mit  $dS_E$  Flächenelement der Fläche konstanter Energie  $E(\mathbf{k}) = E$  und  $\nabla_{\mathbf{k}}E(\mathbf{k}) = dE(\mathbf{k})/dk_{\perp}$ , wobei  $dk_{\perp}$  senkrecht auf  $dS_E$  steht[7]. Bei Einkristallen, welche ein periodisches Gitter aufweisen, steht die Zustandsdichte in Beziehung mit dem Bändermodell und zwar ist diese umgekehrt proportional zur ersten Ableitung der Dispersionsrelation  $E(k)$ . D.h. verläuft ein Energieband flacher, so ist die Zustandsdichte größer, da im Energieintervall  $dE$  mehr Elektronen unterschiedliche Impulsvektoren annehmen können. Verläuft ein Energieband steiler, so ist dementsprechend die Zustandsdichte vergleichsweise geringer. Befindet sich kein Energieband innerhalb eines bestimmten Energiebereichs so spricht man von einer Bandlücke und die Zustandsdichte ist in diesem Bereich null.

## 2.4 Rastertunnelspektroskopie

Anhand von  $I(V)$ -Kennlinien kann man zum Beispiel sehen, ob es sich um einen Halbleiter oder Leiter handelt. Ein Halbleiter hat in einem Bereich, welcher der Größe der Bandlücke entspricht keinen Tunnelstrom, da es keine Zustände in diesem Bereich gibt in welche bzw. von denen getunnelt werden kann. Die Ableitung des Stromes nach der Spannung, welche experimentell meist unter Zuhilfenahme eines Lock-In-Verstärker gemessen wird, ist proportional zur Zustandsdichte der Probe:

$$\frac{dI}{dV}(V, x, y) \propto \rho_s(eV, x, y)$$

Die Energieauflösung ist durch die Temperatur und die Größe der Modulationamplitude der Spannung gegeben durch  $\Delta E \approx \sqrt{(3k_B T)^2 + (2,5eV_{\text{mod}})^2}$ . Die thermische Verbreiterung bei Raumtemperatur  $T=300$  K beträgt etwa 80 meV und verringert sich bei tiefen Temperaturen (zum Beispiel bei  $T=4,2$  K (der Temperatur von flüssigem Helium) beträgt die Energieauflösung 1 meV).

Der exponentielle Abfall des Tunnelstromes mit zunehmendem Abstand der Spitze zur Probe ist materialabhängig. Durch Messung des Stromes bei gleichzeitiger Abstandsänderung  $I(z)$  erhält man Informationen über die Höhe der Potenzialbarriere. Laut Beziehung

2.1 gilt:

$$I(z) = C \cdot \exp\left(-\frac{2\sqrt{m_e(\phi_t + \phi_s)}z}{\hbar}\right)$$

und mittels des natürlichen Logarithmus erhält man

$$\ln(I(z)) = \ln(C) - \frac{2\sqrt{m_e(\phi_t + \phi_s)}z}{\hbar} = \ln(C) - \kappa \cdot z$$

Der erste Term auf der rechten Seite resultiert in einer konstanten Verschiebung und kann vernachlässigt werden. Der Wert von  $\kappa$ , welcher den exponentiellen Abfall von  $I(z)$  beschreibt, ist gegeben durch:

$$\kappa = \frac{2\sqrt{m_e(\phi_t + \phi_s)}}{\hbar}$$

Das heisst, die mittlere Potenzialbarrierenhöhe  $\phi_{\text{PBH}}$  kann durch die Messung von  $\kappa$  bestimmt werden:

$$\phi_{\text{PBH}} = \frac{\phi_t + \phi_s}{2} = \frac{\kappa^2 \hbar^2}{8m_e}$$

## Kapitel 3

# Experimenteller Aufbau

Das im Praktikumsversuch zu verwendende Rastertunnelmikroskop ist das NaoiSTM von der Firma Nanosurf (siehe Abbildung 3.1). Es besteht im wesentlichen aus der Rastereinheit (orangefarbener Teil) und einem kleinen Podest, welcher für die Vibrationsisolierung sorgt. Einen guten visuellen Einblick in den Aufbau und die Funktionsweise bietet das Produktvideo [8]. Weitere detailliertere Informationen können der Gerätebeschreibung des Herstellers entnommen werden [5, 9].

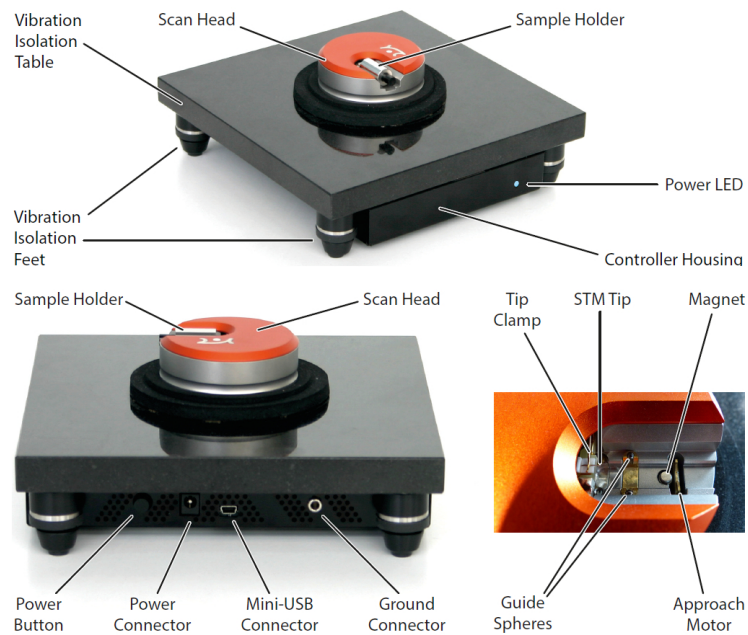


Abbildung 3.1: Aufbau des NaoiSTMs [9].

# Kapitel 4

## Experimentelle Durchführung

### 4.1 Spitzenpräparation

Als Standardspitze ist ein geschnittener Pt/Ir 90/10 Draht zu verwenden. Das Schneiden erfordert etwas Übung und ist hier beschrieben:

- Säubern der Werkzeuge mit Ethanol
- Festhalten des Drahtes mit der Flachzange
- Positionieren der Drahtzange etwa 4 mm vom Drahtende (siehe Abbildung 4.1a)
- Schließen der Drahtzange bis ein Widerstand vom Draht spürbar ist
- Weiteres Schließen der Drahtzange und gleichzeitiges Ziehen der Drahtzange von der Flachzange weg, so dass der Draht eher gerissen als geschnitten wird
- Beim Abtrennen ist ein Geräusch zu hören: Ein höherer Ton deutet auf eine gute Spitze, ein längeres metallisches Geräusch lässt eine nicht so gute Spitze vermuten.
- Einlegen der Spitze in die Spitzenhalterung mittels der Pinzette (siehe Abbildung 4.1b)

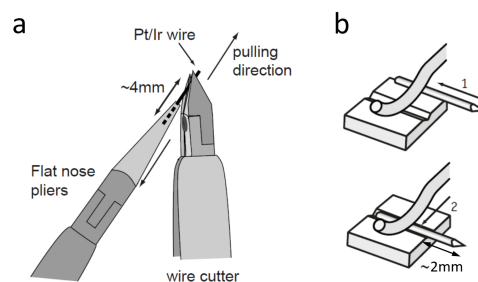


Abbildung 4.1: Spitzenpräparation: a) Abschneiden, b) Einlegen der Spitze in die Spitzenhalterung [9].

## 4.2 Probe einlegen

Die Proben sind auf einem kreisförmigen magnetischem Probenplättchen aufgeklebt. Dieses wird auf den Shuttle positioniert auf dem es durch die magnetische Wechselwirkung haftet (siehe Abbildung 4.2a). Anschliessend wird der Shuttle in die Führung des STMs eingelegt (siehe Abbildung 4.2b und c) und dann so nah an Spitze geschoben, so dass man immer noch einen kleinen Spalt zwischen Spitze und Probe erkennen kann.



Abbildung 4.2: Probe einlegen: a) Probe auf magnetischem Probenplättchen zentral auf den Shuttle positionieren. b) Einlegen des Shuttle in das STM. c) Reihenfolge der einzelnen Schritte des Einlegvorgangs [9].

## 4.3 Annähern

Zum Annähern der Probe an die Spitze wird die Nanosurf Naio Software verwendet. Dazu das Rastertunnelmikroskop einschalten und die Software am PC starten. Mit **Advance** (siehe Abbildung 4.3) bewegt man das Shuttle an die Probe heran. Zur Kontrolle schaut man durch die Lupe (Abbildung 4.4a-b). Ab einem gewissen Abstand sieht man das Spiegelbild der Spitze auf der Probe. Jetzt kann man noch ein Stückchen weiter heranzufahren bis nur noch ein kleiner Spalt zu sehen ist (siehe Abbildung 4.4c). Zur Sicherheit wird jetzt die automatische Annäherung verwendet. Dazu auf **Approach** klicken. Die Spitze wird nun computergesteuert schrittweise weiter angenähert und nach jedem Schritt wird der z-Piezoscanner soweit ausgefahren, bis er einen Tunnelstrom misst. Wird selbst nach maximaler Auslenkung kein Tunnelstrom gemessen wird die Spitze wieder zurückgezogen und ein weiterer Schritt der Probe Richtung Spitze initiiert. Befindet sich die Spitze im Tunnelkontakt ändert sich der **Probe Status** (siehe untere Zeile im Programmfenster) von orange auf grün und das Annähern wird gestoppt und das Scannen (mehr dazu im nächsten Unterkapitel) automatisch gestartet. Sollte der **Probe Status** sich auf rot geändert haben, so ist die Probe in die Spitze gefahren. Sollte dies der Fall sein auf **Withdraw** klicken und anschließend auf **Retract**, um die Probe wieder von

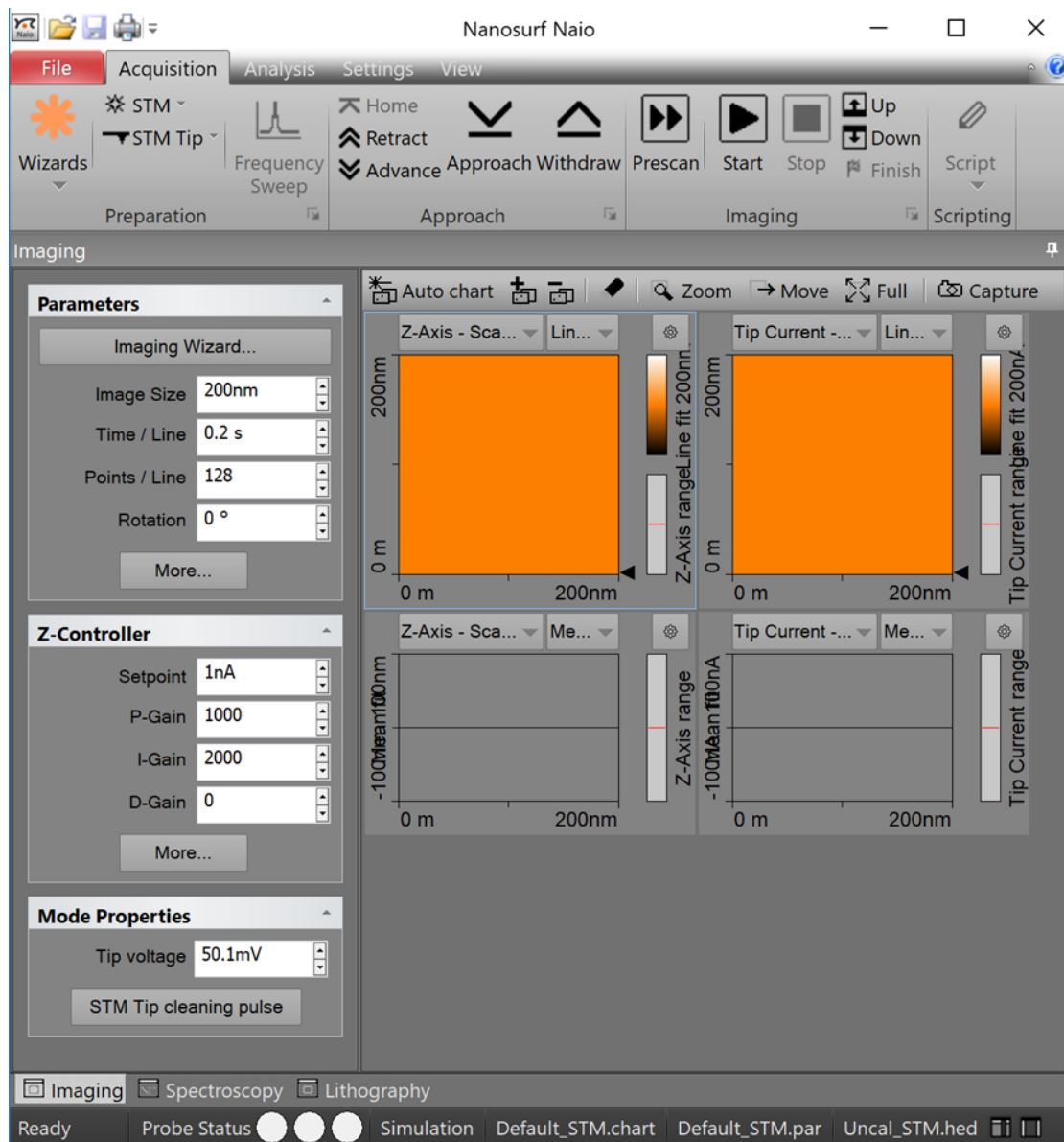


Abbildung 4.3: Benutzeroberfläche des Programms Nanosurf Naio Version 3.8

der Spitze wegzufahren. Sobald die Probe genügend weit entfernt ist, den Probenshuttle am hinteren Ende leicht drehen, um auf einer anderen Stelle nochmals anzunähern. Abhängig vom Probenmaterial kann durch das Eintauchen der Spitze in die Probe die Spitze irreparabel zerstört werden. Dann hilft nur noch eine neue Spitze zu präparieren und einzulegen.

Sollte bei der automatischen Annäherung nach geraumer Zeit (mehr als einer Viertelstunde) keine sichtbare Bewegung des Shuttles erfolgt sein, so ist vermutlich eine Schmutzschicht auf dem Shuttle, wodurch der Stick-Slip Bewegungsmodus nicht mehr funktioniert, da nicht mehr genügend Haftreibung vorhanden ist. Zur Abhilfe den Shuttle und die Auflage des Shuttles vorsichtig mit Ethanol reinigen.

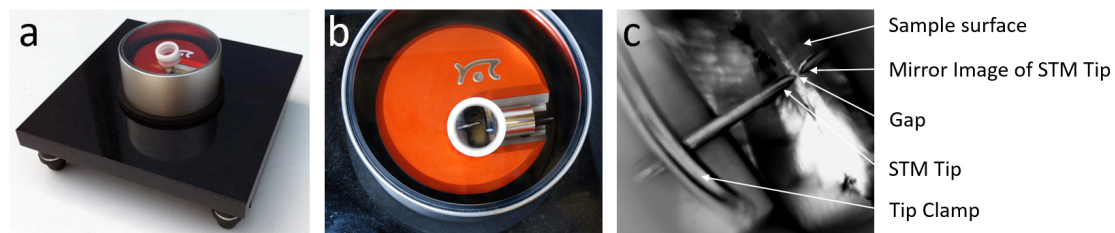


Abbildung 4.4: a) Luftbewegungsschutz mit Lupe, b) Draufsicht, c) Spalt zwischen Spitze und Probe [9].

## 4.4 Scannen

Das Scannen startet automatisch nach dem Approach. Es kann jederzeit durch klicken auf die Schaltfläche **Stop** gestoppt werden und mittels des Playbuttons **Start** wieder gestartet werden.

In den Menüs **Parameters**, **Z-Contoller** und **Mode Properties** können die wichtigsten Scanparameter eingestellt werden. Die Defaultwerte sind in Abbildung 4.3 gezeigt.

- **Image Size** (Bildgröße): Diese richtet sich hauptsächlich danach was man sich auf der Probe anschauen möchte. Um Stufenkanten und Terrassen zu sehen empfiehlt sich ein größerer Bereich zum Beispiel 50-200 nm. Für Ladungsdichtewellen eignen sich 5-50 nm. Für atomare Auflösung nutzt man entsprechend kleinere Bildgrößen 3-5 nm.
- **Time/Line** (Zeit/Linie): Die Zeit die benötigt wird um eine horizontale Linie abzurastern, also Scangeschwindigkeit, richtet sich nach der Bildgröße, der Oberflächenbeschaffenheit und den Regelkreiseinstellungen. Idealerweise wählt man die Geschwindigkeit so groß wie möglich (d.h. die Zeit pro Linie so klein wie möglich) um Zeit zu sparen. Kleine Geschwindigkeiten sind meist unproblematisch. Ist die Geschwindigkeit jedoch zu klein, dann spielt der Drift, das heisst das ungewollte Bewegen der Piezoelemente eine Rolle, welches zu einer Verzerrung des Bildes



führt. Ist die Geschwindigkeit zu groß kann es passieren, dass der Regelkreis sich nicht schnell genug einstellt, wenn die Spitze über eine Stufenkante fährt und die Spitze im schlimmsten Fall in die Stufe rammt.

- **Points /Line** (Zahl der Bildpunkte pro Linie): Der Wertebereich liegt bei 1 bis 2048 Punkten. Typische Werte sind 128, 256 oder 512. Je mehr Bildpunkte desto höher die Auflösung, aber desto länger dauert auch der Scanvorgang. Ein guter Kompromiss sind 256 Punkte.
- **Setpoint** (Sollwert): Der Sollwert des Tunnelstroms ist der Wert den der Regelkreis versucht einzustellen und gibt im wesentlichen den Abstand Spitze zu Probe an. Je höher der Strom desto näher ist die Spitze und umgekehrt je geringer der Strom desto weiter entfernt ist die Spitze von der Oberfläche. Wenn die Spitze näher an der Oberfläche ist desto größer ist die laterale physikalische Auflösung. Jedoch können bei einem zu hohen Strom unerwünschte Modifikationen der Spitze bzw. Oberfläche entstehen. Für atomare Auflösung auf Graphit sind typische Tunnelstromwerte 1-5 nA.
- **P-, I-, D-Gain** (Regelkreisparameter): P-Proportional, I-Integral und D-Differential Gain sind die Werte für den Regelkreis. Typischerweise kann D auf 0 bleiben und P- und I- in Abhängigkeit des Stromes, der Probenrauigkeit und der Rastergeschwindigkeit eingestellt werden.
- **Tip voltage** (Tunnelspannung): Je kleiner die Tunnelspannung, desto geringer der Spitze-Probe Abstand und umgekehrt. Für atomare Auflösung auf Graphit sind typische Tunnelspannungen 50 mV. Bei halbleitenden Materialien ist darauf zu achten, dass die Spannung außerhalb der Bandlücke liegt, da innerhalb der Bandlücke kein Strom fließt.

Die Parameter können während des Scanvorgangs geändert werden. Ist der Scanvorgang eines Bildes abgeschlossen werden die dann aktuellen Parameter im Header der Datei gespeichert. Vorhergehende Parametereinstellungen gehen verloren. Es empfiehlt sich diese vorher zu notieren oder ein gesamtes Bild mit den ursprünglichen Parametern aufzunehmen, so dass diese auch gespeichert werden, sofern diese Parametereinstellungen relevant erscheinen. Öfters als einem lieb ist sieht man ein verrauschtes Bild oder ein Bild was nicht der Erwartung entspricht. Mögliche Ursachen und Lösungen sind im folgenden aufgeführt:

- Probenoberfläche verunreinigt (viele Adsorbate)
  - An anderer Stelle scannen: Für eine neue Stelle innerhalb des Scanbereichs der x-y-Piezos in der Software einen neuen Scanbereich auswählen. Für einen neue Stelle außerhalb des Scanbereichs die Probe zurückfahren, Shuttle etwas drehen und Probe wieder neu annähern.
  - Probe neu präparieren
- Spitze nicht ideal (Mehrfachabbildungen, plötzliche Sprünge in den Scanlinien)
  - Manchmal hilft es einfach zu warten, da während des Scannens die Spitze ein

Molekül aufnehmen oder fallenlassen kann und sich dadurch die Bildqualität verbessern kann.

-Mikroskopisches Spitzenpräparieren: Mittels Spannungspulsen oder bei metallischen Proben leichtes (ein paar Nanometer) Eintauchen der Spitze in die Probe

-Makroskopisch neue Spitze präparieren (siehe Kapitel Spitzenpräparation)

- Probe aus dem Tunnelkontakt (homogene Farbe beim Scannen)  
-Scan stoppen und mit **Approach** wieder annähern
- Periodisches Rauschen (Rauschen von 50 Hz oder Vielfache dessen)  
-Um zu unterscheiden ob die Periodizitäten im Bild von der Probe oder externen Störquellen hervorgerufen werden, Bilder bei unterschiedlichen Scangeschwindigkeiten aufnehmen. Ändert sich die Periodizität ist von einer externen Störquelle auszugehen. Ändert sich die Periodizität nicht, dann wird diese von der Probe hervorgerufen und ist somit real.  
-Erdung und Verkabelung überprüfen
- Piezo-Kriechen (engl. piezo creep) (Bild sieht stark verzerrt aus)  
-Die Piezos ändern ihre Form nicht sofort sobald man die Spannung ändert (zum Beispiel an einer anderen Stelle scannt). Nach einer Weile nehmen die Piezos aber die Form an. Es hilft also einfach zu warten (ein oder mehrere Bilder), bis sich die Piezos auf die neue Spannung eingestellt haben.
- Regelkreis nicht optimal (Stufenkanten unscharf, deutliche Ausschläge im Strombild)  
-PID Werte und Scangeschwindigkeit anpassen

## 4.5 Bildbearbeitung und Bildanalyse

Bei der Aufnahme der Topographie einer Oberfläche mit dem Rastertunnelmikroskop bestehen die Rohdaten aus einer Matrix mit der Größe entsprechend der Anzahl der Punkte entlang einer Linie (Points/ Line) und der Anzahl der Linien pro Bild (Lines/ Frame). Die Messwerte sind im Wertebereich von -32768 bis 32767 entsprechend der 16-bit signed integer Kodierung. Mittels der einmaligen Kalibration, zum Beispiel über die bekannte Höhe einer Stufenkante, werden diese Werte in die physikalische Einheit der Länge [m] umgerechnet. Um diese Matrix sinnvoll darzustellen, werden den Messwerten eine Farbskala zugeordnet, wobei jeder Farbwert einem Wert bzw. Wertebereich (da der Werteraum der Rohdaten meist größer ist als der Werteraum der Farbskala (typischerweise 256)) der  $z$ -Auslenkung des Piezos entspricht. Da die Fläche die durch die  $x,y$ -Bewegung des Scanners aufgespannt wird nicht unbedingt parallel zur Oberfläche der Probe ist, muss zunächst eine Planarisierung erfolgen. Im folgenden wird diese und weitere Bildbearbeitungsschritte anhand des Programms WSxM [10] erläutert.

- Planarisierung: Über **Process/Plane/Local Plane** legt man mittels Rechtecken die Bereiche im Bild fest bei denen man vermutet, dass sie in einer Ebene liegen.

Eine Terrasse auf der Oberfläche eignet sich dafür gut. Alle Datenpunkte werden dann dem Hintergrundabzug unterworfen und man erhält ein planarisiertes Bild. Die  $z$ -Werte entsprechen jetzt den Höhenwerten der Topographie mit der Einschränkung, dass die Topographie einer Probe auch noch von den elektronischen Eigenschaften beeinflusst sein kann.

- **Linienprofil:** Über **Process/Profile** mittels Linksklick ins Bild legt man den Startpunkt und mittels Rechtsklick den Endpunkt einer Linie im Bild fest. In einem extra Fenster wird dann das Höhenprofil entlang dieses Pfades dargestellt. Dies ist sehr nützlich da anstelle der Farben direkt Werte der Höhe angezeigt werden und man Höhen und Abstände direkt ablesen kann.
- **Fast-Fourier-Transformation (FFT):** Über **Process/Filter/2D-FFT** wird die Fouriertransformation des gesamten Bildes durchgeführt. Im damit entstehenden reziproken Raum kann man einerseits Periodizitäten, welche durch die atomare Anordnung erzeugt werden, gut erkennen und andererseits auch bestimmte Frequenzen sehen, welche durch ein unter Umständen vorhandenes Rauschen erzeugt werden. Diese Störanteile kann man ausschneiden und dann eine Rücktransformation **Process/Reverse FFT...** in den Realraum durchführen und man erhält ein bereinigtes Bild ohne die Störfrequenz.
- **Glätten:** Rastertunnelmikroskopaufnahmen unterliegen einem Rauschen, welches unterschiedliche Ursachen haben kann. Idealerweise versucht man bei der Messung so wenig wie möglich Rauschen zu haben, jedoch lässt sich das nicht immer vermeiden. Um das Bild etwas hübscher aussehen zu lassen kann man mittels **Process/Filter/Gaussian smooth...** eine Mittelung über eine bestimmte Anzahl Punkte durchführen (typischerweise 3-5). Dabei ist zu beachten, dass bei einer Mittelung über zu viele Punkte strukturelle Informationen der Oberfläche verloren gehen können.
- **Histogramm:** In bestimmten Fällen, wie zum Beispiel wenn man mehrere Terrassen unterschiedlicher Höhe hat, bietet es sich an ein Histogramm des Bildes zu erstellen. Mittels **Process/Roughness Analysis...** werden alle Datenpunkte gezählt welche in einem bestimmten Höhenintervall liegen und als Funktion der Höhe dargestellt.

Zusätzlich zu den genannten Verfahren stehen eine Vielzahl weiterer Darstellungs- und Bildbearbeitungsroutinen zur Verfügung, wie zum Beispiel die 3D Darstellung, die Wahl anderer und sogar benutzerdefinierter Farbskalen, Zoom Optionen, Entfernung einzelner Scanlinien, parabolischer Hintergrundabzug usw. Je nach Bedarf können diese verwendet werden. Am wichtigsten ist natürlich eine möglichst gute Messung zu machen, so dass später keine oder nur wenige Bildkorrekturen notwendig sind. Je besser die Messung, desto mehr wissenschaftlich verwertbare Informationen kann man den Daten entnehmen.

# Kapitel 5

## Aufgaben

### 5.1 Pflicht

#### 5.1.1 Hochorientierter pyrolytischer Graphit (HOPG)

Graphitkristalle bestehen aus Kohlenstoffatomen, welche in Schichten übereinander angeordnet sind.

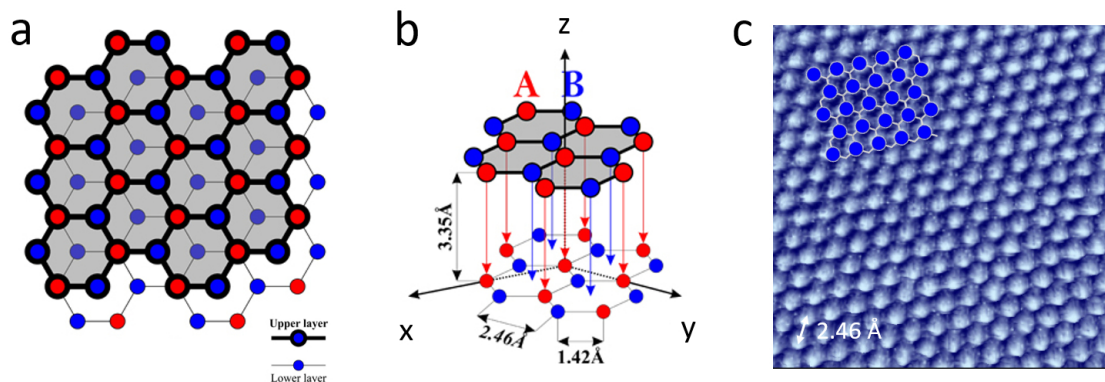


Abbildung 5.1: Atomare Struktur von Graphit. a) Draufsicht, b) 3D [11], c) Topographieaufnahme mit atomarer Auflösung [12].

Aufgabe: Messen Sie atomar aufgelöste Topographiebilder im Konstanter-Strom Modus und bestimmen Sie den Abstand der Atome. Vergleichen Sie den Wert mit der Literatur. Kalibrieren Sie das Rastertunnelmikroskop in  $x$ - und  $y$ -Richtung. Modifizieren Sie dazu die Kalibrierungsdatei und speichern Sie diese unter einem neuen Namen ab und laden diese dann im Programm Nanosurf Naio.

Probenpräparation: Da Graphit ein Schichtmaterial mit schwacher Wechselwirkung zwischen den Schichten ist, lässt sich Graphit gut exfolieren (siehe Abbildung 5.2). Hierzu auf die Graphitprobe Tesafilm aufbringen, leicht anpressen und glatt streichen (mit dem

Finger oder einem stumpfen Gegenstand) und dann langsam den Tesafilm wieder abziehen. Es sollte eine dunkle Schicht auf dem Tesafilm zu sehen sein und die Graphitprobe homogen glatt sein.

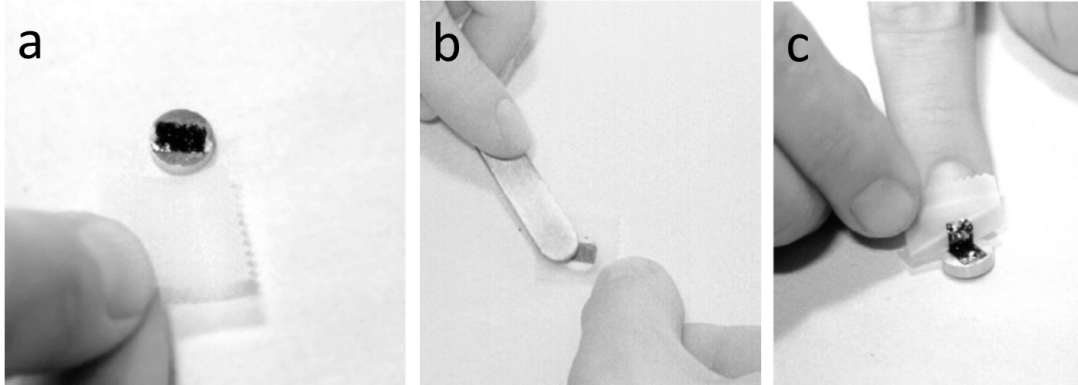


Abbildung 5.2: Exfolierung von Graphit: a) Tesafilm aufkleben, b) Glatt streichen, c) Tesafilm abziehen [9].

### 5.1.2 Au(111)

Die Kristallstruktur von Gold ist kubisch flächenzentriert.

Aufgabe: Bestimmen Sie die Höhe einer Stufe auf der Au(111) Oberfläche. Vergleichen Sie Ihren Wert mit dem Literaturwert. Hinweis: Mittels der Gitterkonstanten von Gold können Sie die Höhe einer Stufe auf der (111) Oberfläche berechnen. Kalibrieren Sie das Rastertunnelmikroskop in z-Richtung. Alternativ können Sie für die Kalibration in z-Richtung auch eine andere Probe, wie zum Beispiel Graphit, verwenden.

Probenpräparation: Au(111) bedarf keiner Präparation. Sollte sich jedoch beim Messen herausstellen, dass die Probe viele Adsorbate aufzeigt kann kurz mit Ethanol die Oberfläche gereinigt werden. Dafür etwas Ethanol über die Probe laufen lassen. Nicht mit einem Tuch abreiben, da dies den dünnen Goldfilm mechanisch zerstört. Sollte noch Ethanol auf der Probe sein, einfach kurz warten bis es verdunstet ist.

### 5.1.3 Potenzialbarrierenhöhe

Messen Sie  $I(z)$ -Kurven und berechnen Sie daraus die Höhe der Potenzialbarriere auf einer ausgewählten Oberfläche. Verwenden Sie dazu den Spektroskopie-Modus.

#### 5.1.4 2D Materialien

Messen Sie eine der folgenden Proben  $\text{TaS}_2$ ,  $\text{MoS}_2$  oder  $\text{WSe}_2$ . Nehmen Sie verschiedene große Bilder auf, so dass einerseits Stufenkanten und Terrassen sichtbar werden und andererseits Atome.  $\text{TaS}_2$  bietet die Besonderheit, dass Ladungsdichtewellen auf der Oberfläche entstehen, welche mit dem Rastertunnelmikroskop abgebildet werden können. Wählen Sie geeignete Parameter, so dass gleichzeitig die Ladungsdichtewellen als auch die atomare Struktur aufgelöst werden.

Probenpräparation:  $\text{TaS}_2$ ,  $\text{MoS}_2$  oder  $\text{WSe}_2$  bedürfen im Normalfall keiner Präparation.

## 5.2 Wahl

In Absprache mit dem Betreuer suchen Sie sich zwei Wahlthemen aus.

### 5.2.1 Selbstorganisierte molekulare Monolagen

Bringen Sie Arachinsäure, Stearinsäure, Hexadecanol oder Trimesinsäure auf eine Graphitoberfläche auf und messen sie mit dem Rastertunnelmikroskop. Die Moleküle zunächst in Phenyloctan oder Toluol lösen [5]. Die Tunnelspitze etwa 2-3 mal mit **Withdraw** zurückziehen, nachdem man atomare Auflösung auf Graphit erhalten hat. Danach mit einer Spritze einen kleinen Tropfen der Lösung am Ende der Kanüle formen und diesen vorsichtig zwischen Spitze und Probe platzieren. Der Tropfen haftet zwischen Spitze und Probe und bleibt dort auch während der STM Messung. Bei Tunnelspannungen ab etwa 1 V werden die Moleküle sichtbar.

### 5.2.2 Materialwahl Spitze

Verwenden Sie Rastertunnelmikroskopspitzen aus unterschiedlichen Materialien (zum Beispiel Pt/Ir 90/10, Pt oder W) und vergleichen Sie deren Eigenschaften bei der Messung und charakterisieren Sie die Spitzen mit dem optischen Mikroskop und dem Rasterelektronenmikroskop.

### 5.2.3 PID Regelkreis

Messen Sie Topographieprofile im Konstanter-Strom Modus senkrecht zu einer Stufenkante mit unterschiedlichen PID-Werten und Scangeschwindigkeiten. Welchen Einfluss haben die einzelnen Faktoren auf das Linienprofil?

### 5.2.4 Rastertunnelspektroskopie

Messen Sie  $I(V)$ -Kennlinien auf ausgewählten Oberflächen. Verwenden Sie dazu den Spektroskopie-Modus. Glätten und differenzieren Sie die  $I(V)$ -Kennlinien um  $dI/dV$  zu erhalten. Interpretieren Sie die Kurven und vergleichen Sie mit den Erwartungswerten in der Literatur.

### 5.2.5 Rauschanalyse

Messen Sie den Tunnelstrom als Funktion der Zeit bei geschlossenem Regelkreis, d. h. im Konstanter-Strom Modus, und analysieren Sie das Rauschen mittels Fourier-Transformation. Interpretieren Sie das Frequenzspektrum.

### 5.2.6 Auslesen der Daten

Erstellen Sie eine MATLAB Routine zum Auslesen einer NID Datei und visualisieren Sie die Messdaten.

## Kapitel 6

# Anforderungen an das Protokoll

Umfang:

Etwa 20-30 A4 Seiten (Schriftgröße: 11, einfacher Zeilenabstand).

Inhalt und Bewertung:

Einleitung (1 Punkt), Theorie (2 Punkte), Versuchsdurchführung (8 Punkte Pflicht + 2x 2 Punkte pro Wahlthema), Präsentation der Rastertunnelmikroskopaufnahmen mit sinnvoller Nachbearbeitung (inklusive Scanparameter: Spannung, Strom, Bildgröße, Farblegende) (10 Punkte), Interpretation der Messungen (5 Punkte), Zusammenfassung (1 Punkt), Literaturverzeichnis (1 Punkt). Für die erfolgreiche Durchführung von mehr als 2 Wahlthemen gibt es jeweils einen Bonuspunkt.

Notenschlüssel:

1.0 32 Punkte, 1.3 31-30 Punkte, 1.7 29-28 Punkte, 2.0 27-26 Punkte, 2.3 25-24 Punkte, 2.7 23-22 Punkte, 3.0 21-20 Punkte, 3.3 19-18 Punkte, 3.7 17-16 Punkte, 4.0 15-14 Punkte, nicht bestanden <14 Punkten.



## Anhang A

### NID Dateistruktur

Allgemein besteht eine Rastertunnelmikroskopiedatei aus einem Header (Dateikopf), welcher die Scanparameter enthält und den eigentlichen Daten am Ende. Das NaoSTM verwendet \*.nid Dateien (Nanosurf Image Document). Hier besteht der Header aus ASCII-Text im 8-bit Format und der Datenteil aus 16 bit signed little endian integers. Wie die Integers zu interpretieren sind wird im Header festgelegt. Im Texteditor (Notepad) sieht eine \*.nid folgendermaßen aus:

```
[DataSet]
Version=2
GroupCount=2
Gr0-Name=Scan forward
Gr0-ID=0
Gr0-Count=8
Gr1-Name=Scan backward
Gr1-ID=0
Gr1-Count=8
Gr0-Ch0=DataSet-0:0
Gr0-Ch1=DataSet-0:1
Gr1-Ch0=DataSet-1:0
Gr1-Ch1=DataSet-1:1
SetInfos=DataSet-Info
InfoSetCount=3
InfoSet0=DataSetInfos
InfoSet1=Calibration
InfoSet2=Parameters
```

```
[DataSet-Info]
- Scan ==-----
Image size=1nm
Scan direction=Up
```

Time/Line=205ms  
Points=256  
Lines=256  
X-Slope=0  $\hat{\text{A}}^\circ$   
Y-Slope=0  $\hat{\text{A}}^\circ$   
Rotation=0  $\hat{\text{A}}^\circ$   
X-Pos=0 m  
Y-Pos=0 m  
Z-Plane=0 m  
Overscan=5 %  
Line mode=Standard  
Date=13-06-2018  
Time=12:30:14  
- Approach -=  
Setpoint=998pA  
P-Gain=10000  
I-Gain=1000  
D-Gain=0  
P-Gain2=0  
I-Gain2=0  
D-Gain2=0  
Tip voltage=50.1mV  
Feedback mode=Free  
Feedback algo.=Adaptive PID  
Error range=200nA  
Ampl. Ctrl. mode=Const. Drive  
- Global -=  
Op. mode=STM  
Head type=STM  
Scan head=Unca1\_STM.hed  
Software ver.=3.8.3.3  
Firmware ver.=3.8.1.0  
Controller S/N=061-18-171  
- Module -=  
Controller Board=2  
USB Module=4

*und so weiter aus Platzgründen sind im weiteren nur die Titel der Parametersektionen dargestellt*

[DataSet\DataSetInfos]  
[DataSet\DataSetInfos\Scan]  
[DataSet\DataSetInfos\Approach]

```

[DataSet\DataSetInfos\Global]
[DataSet\DataSetInfos\Module]
[DataSet\Calibration]
[DataSet\Calibration\Scanhead]
[DataSet\Calibration\Cantilever]
[DataSet\Parameters]
[DataSet\Parameters\Approach]
[DataSet\Parameters\ZFeedback]
[DataSet\Parameters\Lithography]
[DataSet\Parameters\Imaging]
[DataSet\Parameters\SignalIO]
[DataSet\Parameters\Spectroscopy]
[DataSet\Parameters\SPMSystem]
[DataSet-0:0]
[DataSet-0:1]
[DataSet-1:0]
[DataSet-1:1]
[SetView]
[SetView-View0]
[SetView-View1]
[SetView-View2]
[SetView-View3]
[ProcessorSet]

```

*Der Header ist etwa 21450 Byte (Zeichen) groß. Die exakte Größe variiert von Datei zu Datei, je nachdem welche und wieviele Messungen durchgeführt worden sind.*

*An dieser Stelle kommen jetzt die eigentlichen Daten. Im Texteditor (Notepad) sieht das wie folgt aus:*

```

#!JQ+;B;C[K@]??S[C]=[6W;];ONU-I^ usw.

```

Die beiden Zeichen #! markieren das Ende des Headers. Der Rest ist der Anfang vom Datenteil und sieht etwas komisch aus. Das liegt daran, dass die Daten in 16-bit integer gespeichert werden, aber der Texteditor diese als 8-bit ASCII interpretiert und dementsprechend uneingänglich anzeigt. Eine 16-bit Kodierung bedeutet, dass insgesamt 2 Byte also 16 Stellen, welche entweder den Wert 0 oder 1 annehmen können zur Darstellung einer ganzen Zahl verwendet werden. Man beachte die Wertigkeit der Bits fängt innerhalb eines Bytes (8 bits) immer mit dem größten Wert an (z.B.:  $2^7$  oder  $2^{15}$ ). Die Reihenfolge der Bytes kann sich jedoch unterscheiden. Im Fall von little endian, welches hier verwendet wird, belegt die erste Speicheradresse das Byte mit der geringsten Wertigkeit (hier  $2^7$ ), im Falle von big endian ist es das Byte mit der höchsten Wertigkeit dies wäre dann  $2^{15}$ . Zusätzlich unterscheidet man noch ob mit oder ohne Vorzeichen gearbeitet

wird. Die \*.nid Dateien verwenden ein Vorzeichen (sign). Die komplette Kodierung der \*.nid Dateien lautet dann 16-bit signed little endian and entsprechende Beispiele sind im folgenden aufgeführt:

Binär	Dezimal
0000000000000000	0
0000000100000000	1
0000000100000100	1025
1111111101111111	32767
0000000010000000	-32768
0000000110000000	-32767
1111111111111011	-1025
1111111111111111	-1

Allgemein gilt für 16-bit signed little endian:

$$a \cdot 2^7 + b \cdot 2^6 + c \cdot 2^5 + d \cdot 2^4 + e \cdot 2^3 + f \cdot 2^2 + g \cdot 2^1 + h \cdot 2^0 + i \cdot 2^{15} + j \cdot 2^{14} + k \cdot 2^{13} + l \cdot 2^{12} + m \cdot 2^{11} + n \cdot 2^{10} + o \cdot 2^9 + p \cdot 2^8$$

$$\forall a - h, j - p \in [0, 1] \text{ and } i = 0 \text{ Dezimal}$$

$$\forall a - h, j - p \in [0, 1] \text{ and } i = 1 \text{ Dezimal} - 2^{16}$$

Alle Datenpunkte können somit einen Wert von  $-32768$  bis  $+32767$  annehmen, entsprechend 16-bit also einem Wertebereich von  $2^{16} = 65536$ . Die eigentlichen physikalischen Größen wie zum Beispiel der Tunnelstrom oder  $z$  müssen beim Lesen und Auswerten der Datei mittels der Informationen im Header berechnet werden.

$$I_{Wert}[Dim2Unit] = \frac{I_{Datenpunkt} + 2^{(SaveBits-1)}}{2^{SaveBits}} * Dim2Range + Dim2Min \quad (A.1)$$

$$z_{Wert}[Dim2Unit] = \frac{z_{Datenpunkt} + 2^{(SaveBits-1)}}{2^{SaveBits}} * Dim2Range + Dim2Min \quad (A.2)$$

Alle Daten werden nacheinander in die Datei geschrieben. In [DataSet-A:B] wobei A die Gruppennummer (Group) angibt and B die Kanalnummer (Channel), wird festgelegt wo zum Beispiel das Topographie- oder das Strombild gespeichert wird. Alle Daten spannen eine Matrix auf, welche in Abbildung A.1 schematisch dargestellt ist.

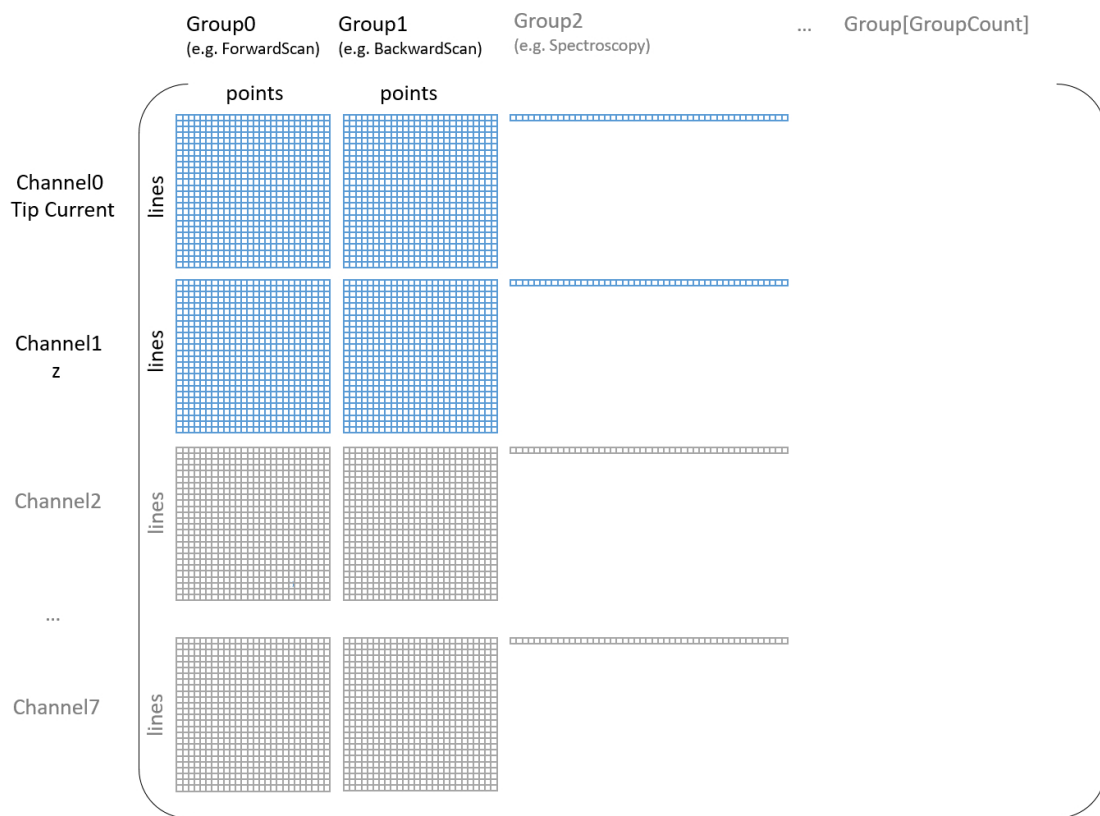


Abbildung A.1: Datenmatrix einer \*.nid Datei

Jetzt nehmen wir nochmal das Datenbeispiel:

J[Q][B];[C][K][@]?[?][S][C]=[6][W];[O][N][U]-[I]^ usw.

Dies können wir jetzt wie folgt interpretieren: In der ASCII Tabelle werden den Zeichen eine Dezimalzahl zugeordnet. In Dezimalschreibweise lautet die Zeichenfolge also so:

74, 1, 81, 1, 43, 1, 66, 1, 59, 1, 67, 1, 75, 1, 64, 1, 63, 1, 63, 1, 1, 83, 1, 67, 1, 61, 1, 54, 1, 87, 1, 59, 1, 59, 1, 79, 1, 78, 1, 85, 1, 45, 1, 73 ,1 ,94 ,1

Betrachtet man die Datei in einem anderen Editor wie zum Beispiel Notepad++ so sieht man, dass es noch eine zusätzliche Dezimalzahl gibt, im folgenden dick markiert:

74, 1, 81, 1, 43, 1, 66, 1, 59, 1, 67, 1, 75, 1, 64, 1, 63, 1, 63, 1, **29**, 1, 83, 1, 67, 1, 61, 1, 54, 1, 87, 1, 59, 1, 59, 1, 79, 1, 78, 1, 85, 1, 45, 1, 73 ,1 ,94 ,1

Dies liegt daran, dass im ASCII-code die Dezimalzahlen von 0-31 mit Funktionen belegt sind. Zum Beispiel bewirkt 13 ein Zeilenumbruch. Damit erklärt sich auch warum die Länge einer Zeile, wenn man Sie im Texteditor (Notepad) anschaut so unterschiedlich lang ist. In unregelmäßigen Abständen erscheint ein Byte, welches als 13 interpretiert wird und dann im Texteditor einen Zeilenumbruch bewirkt. Sieht man also einen Zeilenumbruch ist dieser dann als Dezimalzahl 13 zu interpretieren. Leider gibt es zum Beispiel die Dezimalzahl 29, welche eine Gruppentrennung bewirkt. Visuell passiert aber gar nichts. Insofern geht die Information bei der Umwandlung der Binärdatei in den Texteditor (Notepad) verloren. Im folgenden verwenden wir die komplette Zahlenfolge aus Notepad++. Diese Zahlenfolge ist im 8-bit Format. Die ersten 4 Dezimalzahlen im Beispiel 74, 1, 81, 1 also die ersten 4 Byte lauten in Binärschreibweise 01001010, 00000001 ,01010001, 00000001. Diese Folge von Nullen und Einsen ist aber nicht im 8-bit, sondern im 16-bit signed little endian System zu interpretieren. Man schreibt dann 0100101000000001, 0101000100000001. Und hat also nur noch zwei Zahlen. Diese sind 330, 337. Die gesamte Zahlenfolge des Beispiels lautet nun:

330, 337, 299, 322, 315, 323, 331, 320, 319, 319, 285, 339, 323, 317, 310, 343, 315, 315, 335, 334, 341, 301, 329, 350 usw.

Das sieht doch schon vernünftiger aus. Das sind die reinen Datenwerte, diese müssen jetzt mit den Angaben im Header interpretiert werden. In [DataSet-0:0], welches die erste Matrix beschreibt steht geschrieben, dass es sich um den Tip Current Forward Scan handelt. Es sind also die ersten 24 Datenpunkte entlang der Linie 0. Im Bild links unten nach rechts laufend. Mittels Gleichung A.1 können diese nun in Stromwerte umgerechnet werden und man erhält:

1.00708E-09 A, 1.02844E-09 A, 9.12476E-10 A, 9.82666E-10 A, 9.61304E-10 A, 9.85718E-10 A, 1.01013E-09 A, 9.76562E-10 A, 9.73511E-10 A, 9.73511E-10 A, 8.69751E-10 A, 1.03455E-09 A, 9.85718E-10 A, 9.67407E-10 A, 9.46045E-10 A, 1.04675E-09 A, 9.61304E-10 A, 9.61304E-10 A, 1.02234E-09 A, 1.01929E-09 A, 1.04065E-09 A, 9.18579E-10 A, 1.00403E-09 A, 1.06812E-09 A

Dies sieht jetzt hübsch aus. Würde man diese Zahlen als Zeichen im ASCII Format speichern, würde man 358 Byte benötigen. Im 16-bit signed little endian sind nur 48 Byte notwendig, also nur ein Bruchteil. Es muss zwar noch der Speicherplatz für die Informationen im Header berücksichtigt werden, aber dieser ist im Vergleich zum Gesamtteil der Daten sehr gering. Für sehr große Datenmengen bietet sich also die Speicherung als Integer an, da diese insgesamt weniger Speicherplatz benötigt. Das hier beschriebene Verfahren des Auslesens der Daten mittels des Texteditors ist natürlich recht umständlich und diente hauptsächlich zur Veranschaulichung. Einfacher lassen sich die Daten mit einem Programm wie zum Beispiel MATLAB mittels eines entsprechendem Programmcodes auslesen.

# Literaturverzeichnis

- [1] G. Binnig, H. Rohrer „Scanning tunneling microscopy“ *Surface Science* 126, 236 (1983)
- [2] J. Coraux, A. T. N'Diaye, C. Busse, T. Michely „Structural coherency of Graphene on Ir(111)“ *Nano Letters* 8, 565 (2008)
- [3] D. M. Eigler, E. K. Schweizer „Positioning single atoms with a scanning tunneling microscope“ *Nature* 344, 524 (1990)
- [4] R. Ohmann, J. Meyer, A. Nickel, J. Echeverria, M. Grisolia, C. Joachim, F. Moresco, G. Cuniberti „Supramolecular Rotor and Translator at Work: On-Surface Movement of Single Atoms“ *ACS Nano* 9, 8394 (2015)
- [5] „PHYWE Operating Instructions and Experiments Scanning Tunneling Microscope (STM)“  
[https://repository.curriculab.net/files/bedanl.pdf/09600.99/e/01192\\_02.pdf](https://repository.curriculab.net/files/bedanl.pdf/09600.99/e/01192_02.pdf)
- [6] J. Tersoff, D. R. Hamann „Theory of the scanning tunneling microscope“ *Phys. Rev. B* 31, 805 (1985)
- [7] R. Gross, A. Marx „Festkörperphysik“ *Oldenbourg Wissenschaftsverlag GmbH* (2012)
- [8] „Compact STM, Rastertunnelmikroskop“  
[www.youtube.com/watch?v=SmhUmY8a0wI](http://www.youtube.com/watch?v=SmhUmY8a0wI)
- [9] „NaioSTM Operating Instructions for Naio Control Software Version 3.8“
- [10] WSxM: A software for scanning probe microscopy and a tool for nanotechnology  
[www.wsxm.es](http://www.wsxm.es)
- [11] Advanced Integrated Scanning Tools for Nano Technology  
<http://nanoprobes.aist-nt.com/apps/HOPGinfo.htm>
- [12] Homepage Firma Nanosurf  
[www.nanosurf.com](http://www.nanosurf.com)