

# 4 Quantentopf-Zustände in dünnen Yb(111)-Filmen

Die in Kap. 5 und 6 untersuchten dreiwertigen Lanthanidmetall-Oberflächen weisen im Zentrum der Brillouinzone in der Nähe der Fermi-Energie eine breite Bandlücke auf, in welcher sich der Oberflächenzustand befindet. Weil dieser eine verschwindende Dispersion entlang der Oberflächen-Normalen besitzt, können die Elektronen sich nur parallel zur Oberfläche bewegen, nicht aber senkrecht dazu. Die daraus folgende geringe Wechselwirkung mit dem darunter liegenden Volumen führt dazu, daß der Oberflächenzustand bereits bei extrem dünnen Schichten voll ausgeprägt ist und keinerlei Unterschiede zum Oberflächenzustand eines unendlich dicken Films zeigt.

Anders wird dieses Szenario an der Oberfläche von Yb(111), wo um die Fermi-Energie ein Volumenband mit relativ starker Dispersion senkrecht zur Oberfläche existiert (vgl. Kap. 2.1). Elektronen in diesen Bändern können sich somit von der Oberfläche in das Volumen und zurück bewegen, und unter der Oberfläche verborgene Störungen des Yb-Kristalls beeinflussen ihre Bewegungen. Wie sich im folgenden zeigen wird, werden die Elektronen in ultradünnen Filmen an der Grenzfläche zum Wolframsubstrat und an der Oberfläche reflektiert und bilden stehende Wellen aus, welche in der Tunnelspektroskopie durch Quantenresonanzen identifiziert werden können (s. Kap. 2.3). Aus den Daten lassen sich Informationen über das beteiligte senkrechte Volumenband und die Grenzfläche gewinnen. Zunächst wird aber die Morphologie der ultradünnen Yb(111)/W(110)-Filme diskutiert, welche einige Besonderheiten gegenüber jener der dreiwertigen Lanthanidmetalle zeigt.

## 4.1 Morphologie dünner Yb(111)-Filme

Die Präparation der dünnen Ytterbium-Filme auf W(110) findet gemäß der Beschreibung in Kap. 3.2.2 statt, d.h. die Filme werden bei Zimmertemperatur aufgedampft und nicht getempert. Dies führt zu einem fcc-Wachstum mit einer (111)-Oberfläche [Bod94]. Abb. 4.1 zeigt die STM-Topographie von drei Yb-Filmen mit jeweils unterschiedlicher nomineller Schichtdicke (12, 20 und 130 ML). In den Übersichtsbildern (a-c) kann man die Zunahme der Rauigkeit erkennen. Während der 12-ML-Film sieben verschiedene lokale Schichtdicken zeigt, können beim 20-ML-Film zehn unterschiedliche lokale Filmdicken identifiziert werden. Der 130-ML-Film zeigt mehr als 30 verschiedene Lagen. An den großen, flachen Terrassen mit monoatomarer Stufung ist erkennbar, daß der Yb-Film geordnet wächst.

Eine Nahaufnahme (d-f) zeigt zwei verschiedene, deutliche Stufenkanten zwischen benachbarten Terrassen, welche eine exakte Bestimmung der Schichtdickenänderung relativ zu einer Bezugsterrasse ermöglichen. Zum einen findet man Stufenkanten von

#### 4 Quantentopf-Zustände in dünnen Yb(111)-Filmen

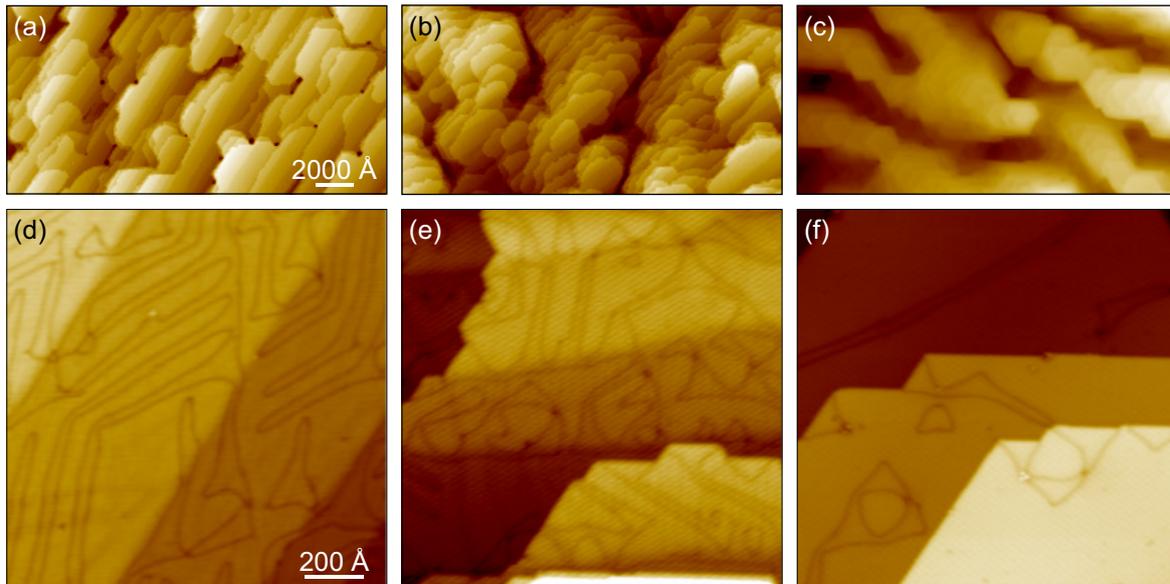


Abbildung 4.1: Topographie eines ungetemperten Yb(111)/W(110)-Films bei unterschiedlichen nominellen Schichtdicken von 12 (a,d), 20 (b,e) und 130 ML (c,f). Lokale Änderungen der Schichtdicke einzelner Terrassen sind zu erkennen. Die Grabenstrukturen sind vermutlich Dislokationen, die durch das verspannte Filmwachstum verursacht werden. ( $T = 11$  K; oben:  $2 \times 1 \mu\text{m}^2$ , 1 V, 1 nA; unten:  $130 \times 130 \text{ nm}^2$ ,  $-1$  V, 1 nA).

ca.  $3,2 \text{ \AA}$  Höhe (e,f), welche der Änderung der lokalen Schichtdicke um eine Monolage entsprechen. Zum anderen findet man Terrassen mit einem Höhenunterschied von ca.  $0,9 \text{ \AA}$ , welche durch die Stufung des Wolframsubstrats verursacht wird (vgl. Stufen in (d)): Während die Höhe einer W-Stufe  $d_w = 2,23 \text{ \AA}$  beträgt, ist die Lagenhöhe von Yb  $d_{\text{yb}} = 3,17 \text{ \AA}$ . Die lokale Yb-Schichtdicke bleibt über die abfallenden W-Stufen nicht konstant (ansonsten wären Stufenkanten von  $2,23 \text{ \AA}$  Höhe beobachtbar), sondern erhöht sich um je eine Lage, was an der Oberfläche zu einer Stufenkante von  $d_{\text{yb}} - d_w = 0,94 \text{ \AA}$  führt. Abb. 4.1(d) zeigt also Terrassen, deren Schichtdicke sich von links oben nach rechts unten um je eine Lage ändert. Auf der Oberfläche des 130 ML dicken Films sind diese kleinen Stufen nicht beobachtbar. Mit zunehmender Schichtdicke wird also diese Störung der Kristallordnung zunehmend abgebaut.

Neben dem Stufenkontrast sind in den STM-Bildern deutlich langgezogene Grabenstrukturen zu erkennen, die bei keiner anderen untersuchten Lanthanidmetalloberfläche beobachtet werden können (s. Kap. 3.2.2). Die Tiefe der Gräben variiert spannungsabhängig zwischen  $0,1$  und  $0,6 \text{ \AA}$  (s. Abb. 4.2) bei einer Breite von  $(20 \pm 3) \text{ \AA}$  (FWHM). Die Dichte dieser Strukturen nimmt mit zunehmender Schichtdicke deutlich ab. Ferner kann man eine bevorzugte Paarbildung von immer zwei Gräben mit einem Abstand von  $(39 \pm 4) \text{ \AA}$  erkennen. Bei hoher Dichte bildet sich ein periodisches Muster von parallel verlaufenden Doppellinien mit einer Periodenlänge von  $(100 \pm 10) \text{ \AA}$  (d). Bei diesen Strukturen handelt es sich sehr wahrscheinlich um Verspannungsdomänen, welche durch die Gitterfehlانpassung zwischen der W(110)-Grenzfläche und dem Yb-Film entstehen. Verspannungsdomänen mit sehr ähnlichen Rekonstruktionen sind z.B. an Oberflächen von Au(111) [Bar90, Nar92] und dünnen Cu-Filmen auf Ru(0001) beobachtet worden [Pöt91, Gün95]. An der Oberfläche wird die Verspannung durch den Einbau von Disloka-

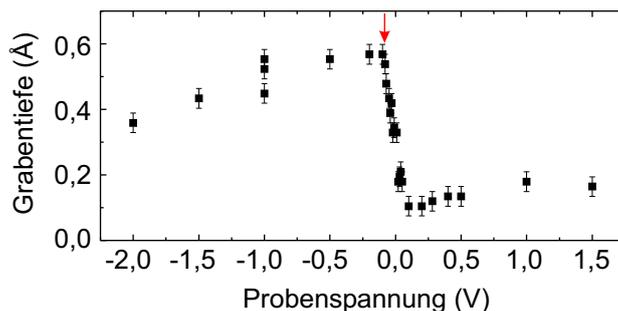


Abbildung 4.2: Tiefe der Grabenstrukturen als Funktion der Tunnelspannung. Der rote Pfeil markiert das Bandminimum des  $\Gamma$ - $L$ -Bandes am  $L$ -Punkt.

tionslinien kompensiert, innerhalb derer ein Übergang von der fcc-Stapelfolge der einen Domäne zur hcp-Stapelung der nebenliegenden Domäne stattfindet. Auf diese Weise kann die mittlere Dichte der Oberflächenatome geändert und somit die Verspannung zum Substrat reduziert werden. Dies ist bei Yb denkbar, weil sich die beiden Stapelfolgen energetisch nur wenig unterscheiden [Kay71, Bon78]. Das Flächenverhältnis der beiden Domänen ist nicht ausgeglichen, was die Bevorzugung der fcc- gegenüber der hcp-Stapelung widerspiegelt. Die klare Bevorzugung zweier Richtungen weist auf eine uniaxiale Verspannung hin. Mit zunehmender Schichtdicke findet die Relaxation der Verspannung immer isotroper statt (e). Schließlich kann die Gitterverzerrung im Falle des dicken Films durch das zunehmend inselartige Wachstum fast komplett kompensiert werden, so daß nur wenige Dislokationslinien übrig bleiben. Ob die Dislokationslinien nur an der Oberfläche erscheinen oder auch noch darunter liegende Lagen rekonstruieren, kann mittels STM nicht geklärt werden. Im Prinzip ist beides möglich [Gün95]. Erstaunlich ist die Tatsache, daß die Verspannung über einen relativ großen Schichtdickenbereich abgebaut wird und selbst noch nach 130 ML ( $\approx 412 \text{ \AA}$ ) Dislokationen zu erkennen sind. Im o.g. Beispiel Cu/Ru(0001) ist die Verspannung nach nur wenigen Lagen bereits vollständig abgebaut.

## 4.2 STS-Ergebnisse

Für die Aufnahme von Tunnelspektren werden zunächst nur Bereiche der Terrassen ausgewählt, welche möglichst weit entfernt von den Dislokationslinien ( $> 100 \text{ \AA}$ ) liegen, um deren Einfluß auf die elektronische Struktur ausschließen zu können (vgl. Kap. 4.4). Gleichzeitig garantiert die Wahl einer möglichst großen Domäne, daß nur STS an fcc-gestapelten Oberflächen durchgeführt wird. Abb. 4.3 zeigt exemplarisch zwei Tunnelspektren und zum Vergleich ein Photoemissions-Spektrum<sup>1</sup>. Alle Spektren zeigen übereinstimmend ein verschwindendes Signal bei negativen Energien, wo in der elektronischen Struktur eine Bandlücke bei  $\bar{\Gamma}$  identifiziert werden kann (vgl. Abb. 2.1(e,f)). Ab ca.  $-80 \text{ meV}$  steigt das Signal an, was als das Bandminimum des  $\Gamma$ - $L$ -Volumenbandes zu interpretieren ist. Während also sowohl PES als auch STS das Bandminimum *unterhalb*  $E_F$  messen, liegt es in den Bandstruktur-Rechnungen ca.  $0,1 \text{ eV}$  *oberhalb*  $E_F$ . Das PES-Signal wird an der Fermi-Kante abgeschnitten, das Tunnelspektrum des dicken

<sup>1</sup>Die ARPES-Daten wurden freundlicherweise von O. Malyska zur Verfügung gestellt und reproduzieren die Ergebnisse aus [Bod94, Wes00].

#### 4 Quantentopf-Zustände in dünnen Yb(111)-Filmen

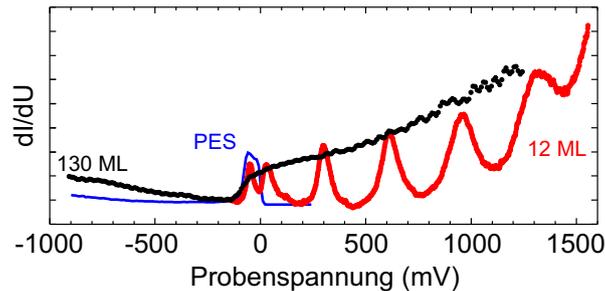


Abbildung 4.3: STS an einem dicken Yb(111)-Film (schwarz) zeigt die zu erwartende kontinuierliche Zustandsdichte des  $\Gamma$ -L-Bandes ab dem Bandminimum ( $\sim -80$  meV) in guter Übereinstimmung mit Resultaten aus der Photoemission (blau). Bei sehr dünnen Filmen (rot) zeigen sich scharfe Resonanzen, die QW-Zustände.

Yb-Films zeigt aber, daß die Zustandsdichte erwartungsgemäß kontinuierlich bestehen bleibt.

Ein deutlich anderes Bild zeigt sich für das auf einem 12 ML dünnen Film aufgenommene Tunnelspektrum: Statt des kontinuierlichen Verlaufs erkennt man scharfe Resonanzen, zwischen denen die differentielle Leitfähigkeit – und damit auch die Zustandsdichte – praktisch auf Null abfällt. Der Vergleich mit dem 130-ML-Spektrum legt die Annahme nahe, daß sich zwischen der Yb-Oberfläche und der Yb-W-Grenzfläche stehende Elektronenwellen ausbilden, also *quantum-well*-Zustände, wie bereits in Kap. 2.3 beschrieben. Dies kann leicht durch systematische STS-Messungen für unterschiedliche Schichtdicken bestätigt werden. Abb. 4.4 faßt die Ergebnisse für alle untersuchten lokalen Schichtdicken zusammen. Die unteren sieben Spektren sind auf dem nominell 12 ML dicken Film aufgenommen worden, die oberen acht auf dem 20-ML-Film. Die Angabe der Schichtdicke neben den Spektren (in ML) weist einen systematischen Fehler von  $\pm 1$  ML auf, weil sie auf der Annahme beruht, daß die mittlere Höhe der STM-Bilder des rauhen Films der nominellen Schichtdicke entspricht. Zudem besteht die Möglichkeit, daß die ersten Yb-Lagen wegen der Gitterfehlpassung zum Wolframsubstrat rekonstruieren und eine vom Volumenwert abweichende Schichtdicke aufweisen (die ist z.B. für die ersten zwei Lagen Gd(0001)/W(110) bekannt [Nep00]). Die relative Änderung von jeweils 1 ML von Spektrum zu Spektrum ist dagegen ohne Fehler, weil die Stufen durch Vergleich der STM-Bilder abgezählt und ausgemessen werden können (s.o.).

Die deutlich sichtbare systematische Änderung der Spektren mit der Schichtdicke beweist die Existenz von QW-Zuständen: Mit zunehmender Schichtdicke schieben die Eigenenergien immer enger zusammen. Im betrachteten Energiebereich besitzt W(110) keine Bandlücke. Die Ausbildung der QW-Zustände ist also nur durch die Existenz einer Symmetrielücke zu erklären, d.h. an der Yb-W-Grenzfläche findet keine oder eine nur sehr schwache Hybridisierung des beteiligten Yb-Bands mit den Wolframbändern statt.

Die QW-Zustände sind bis zu einer Energie von 1,6 eV gut zu erkennen. Darüber steigt das Untergrund-Signal (vermutlich wegen der Spannungsabhängigkeit der Tunnelwahrscheinlichkeit  $T$ ) so stark an, daß eine Identifizierung weiterer QW-Zustände schwierig ist.

An dieser Stelle sei besonders darauf hingewiesen, daß die hier gezeigten Ergebnisse mit oberflächenintegrierenden Methoden wie PES, IPES oder 2PPES nicht meßbar wä-

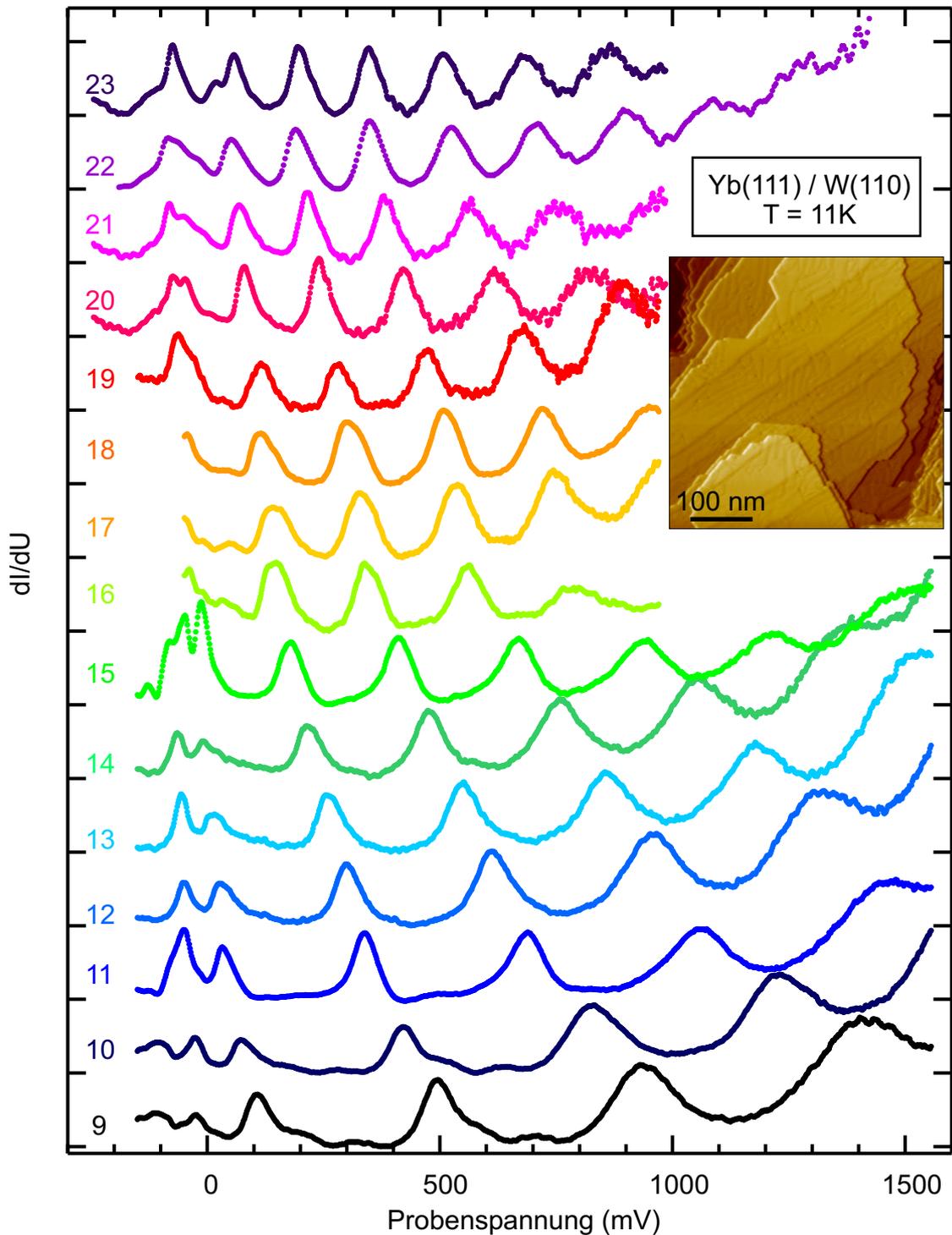


Abbildung 4.4: Übersicht von Rastertunnelspektren auf unterschiedlich dicken Yb-Terrassen bei 11 Kelvin. Links ist die jeweilige lokale Schichtdicke in Monolagen angegeben, die aus der Topographie der STM-Bilder (z.B. Bild oben rechts) ermittelt wurde.

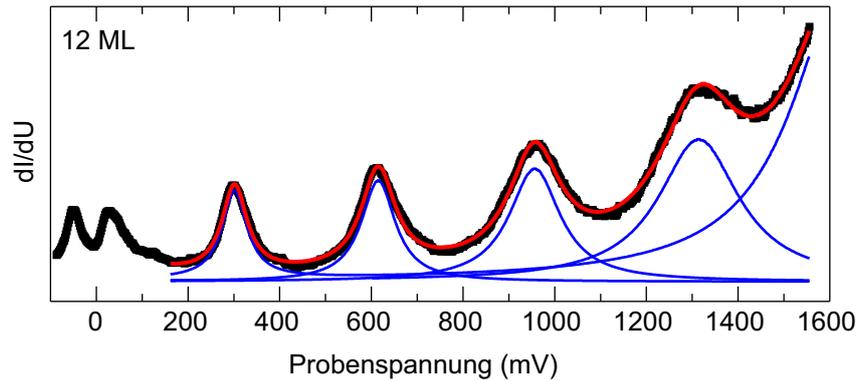


Abbildung 4.5: Fitanalyse der Yb-Spektren am Beispiel von 12 ML: Die Datenpunkte (schwarz) werden durch die Fitkurve (rot) gut beschrieben, welche sich aus mehreren Lorentzkurven (blau) zusammensetzt.

ren, denn durch die Mittelung des Signals über alle auftretenden lokalen Schichtdicken des rauhen Yb-Films würden keine einzelnen QW-Zustände mehr identifiziert werden können. Wegen ihrer hohen Ortsauflösung und der guten spektroskopischen Eigenschaften ist die Rastertunnelspektroskopie die ideale und vermutlich einzige Meßmethode, um die quantisierte Natur dünner Yb-Schichten aufdecken zu können.

### 4.3 Auswertung und Diskussion

Um die Schichtdickenabhängigkeit der QW-Zustände quantitativ analysieren zu können, wurden alle Spektren gemäß dem Modell von Kap. 2.4.1 mit Hilfe von Lorentzlinien gefittet. Dies ist gerechtfertigt, weil man aus der Oberflächen-Bandstruktur in Abb. 2.1(f) erkennen kann, daß die Dispersion parallel zur Oberfläche extrem flach verläuft. Im Bereich 50...1600 meV führt die Fitanalyse zu guten Ergebnissen, darunter kann man aber schon in den Spektren selbst kompliziertere Formen erkennen, deren Ursache unklar ist. Vermutlich zeigen sich in der asymmetrischen Form Details der Dispersion (vgl. Kap. 6), deren genauer Verlauf aber unbekannt ist. Daher werden in der folgenden Analyse nur QW-Zustände ab 50 meV berücksichtigt, deren Linienbreiten deutlich größer sind, so daß sie eine annähernd symmetrische Form aufweisen.

Abb. 4.5 zeigt exemplarisch den Fit eines 12-ML-Spektrums, welcher die Messung gut wiedergibt. Die aus den Fits gewonnenen Positionen der QW-Zustände sind als Funktion der Schichtdicke in Abb. 4.6(a) aufgetragen. Die Zuordnung zu jeweils derselben Quantenzahl  $\nu$  zeigt die farbige Untermauerung. Mit abnehmender Schichtdicke erhöht sich demnach die Energie, wie es für Zustände in der Nähe des Brillouinonenrands zu erwarten ist (s. Kap. 2.3) [Ort92, Kaw99].

Die Dispersion des beteiligten  $\Gamma$ - $L$ -Volumenbandes kann gemäß Gl. 2.17 durch Vergleich der Schichtdickendifferenz für zwei QW-Zustände unterschiedlicher Quantenzahl  $\nu$  und  $\nu'$  bei fester Energie berechnet werden. Zwar sind die den QW-Zuständen zuzuordnenden Quantenzahlen noch nicht bekannt, für die Lösung von Gl. 2.17 ist aber lediglich deren Differenz notwendig. Um  $d$  als kontinuierliche Variable behandeln zu können, werden die Datenpunkte jeweils einer Quantenzahl unter Berücksichtigung der Streuung interpoliert (farbige Kurven in Abb. 4.6(a)) [Mue89]. Die Auswertung nach

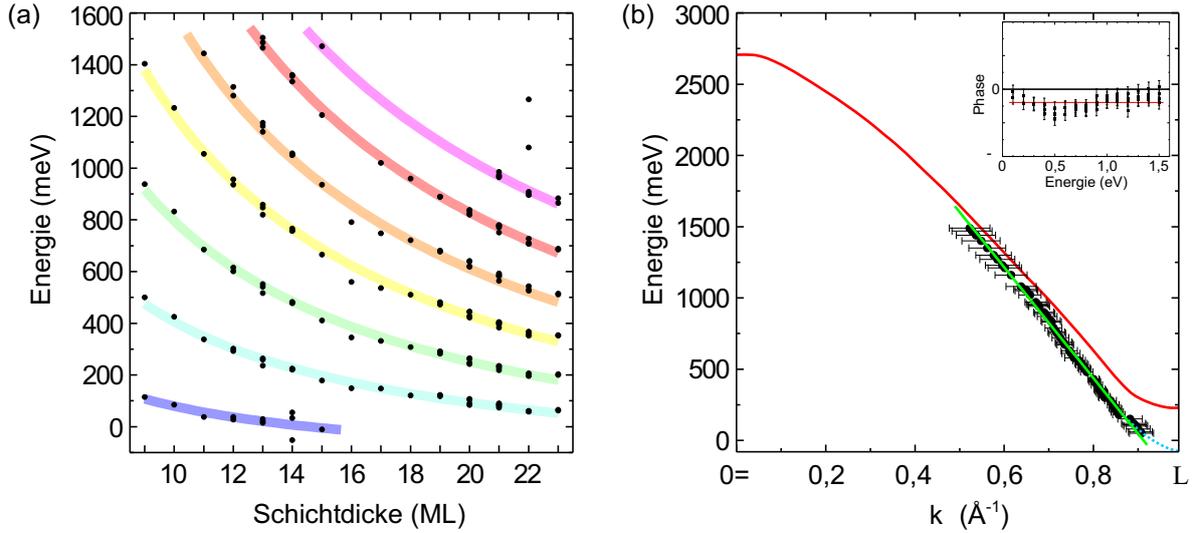


Abbildung 4.6: (a) Energiepositionen der QW-Zustände als Funktion der Schichtdicke; die Zuordnung zu jeweils derselben Quantenzahl  $\nu = 1 \dots 7$  (von unten nach oben) ist farbig hervorgehoben. (b) Berechnung der Banddispersion aus den in (a) gezeigten Daten (schwarze Punkte) im Vergleich zur theoretisch berechneten Dispersion aus [Joh70] (rot). Im untersuchten Bereich kann die Dispersion linear approximiert werden (grün), am  $L$ -Punkt ist ein Abflachen (ähnlich der blauen Punktlinie) zu erwarten. Inset: Die Reflexionsphase  $\delta$  als Funktion der Energie kann im betrachteten Bereich als nahezu konstant angenommen werden. Die rote Linie markiert den Mittelwert  $\delta = -0,6 \pm 0,4$ .

Gl. 2.17 führt zu der in Abb. 4.6(b) gezeigten Dispersion (schwarz), welche im gemessenen Bereich linear genähert werden kann (grüne Linie). Die Steigung beträgt  $dE/dk = (3,89 \pm 0,04) \text{ eV}\text{\AA}$ , was einer Gruppengeschwindigkeit von  $v_g = (5,91 \pm 0,06) \cdot 10^5 \text{ m/s}$  entspricht. Im Vergleich zur theoretischen Bandstruktur-Rechnung (rot, aus [Joh70], vgl. Abb. 2.1(e)) zeigt sich eine in Richtung des  $L$ -Punktes zunehmende Abweichung der experimentell bestimmten Dispersion. Diese ist allein schon deshalb zu erwarten, weil im Experiment das Bandminimum am  $L$ -Punkt mit  $-80 \text{ meV}$  deutlich niedriger bestimmt wurde. Die Dispersion sollte aber zum  $L$ -Punkt hin abflachen, wo die Bragg-Bedingung erfüllt ist und sich stehende Wellen bilden (d.h.  $dE/dk \rightarrow 0$ ). Dieser zu erwartende Verlauf ist schematisch durch die blaue Punktlinie in Abb. 4.6(b) angedeutet. Abgesehen von den PES-Messungen, welche das Bandminimum bestätigen, existieren keine experimentellen Studien über die unbesetzte Bandstruktur von fcc-Yb. Die hier vorliegenden ersten experimentellen Daten zur Dispersion des  $\Gamma$ - $L$ -Bandes zeigen Abweichungen gegenüber berechneten Bandstrukturen. Neuere Methoden der LDA könnten aber zu einer besseren Übereinstimmung führen.

Mit Hilfe der nun bekannten Dispersion kann anhand des Vergleichs der Bandstruktur mit den QW-Zuständen auch die Quantenzahl  $\nu$  identifiziert werden. Nach Gl. 2.16 wird der reziproke Raum von  $\Gamma$  nach  $L$  in  $m + 1$  äquidistante Schritte ( $m$  ist die Anzahl der Yb-Lagen) von  $\nu = 0$  am  $L$ -Punkt bis  $\nu = m$  am  $\Gamma$ -Punkt quantisiert. Im Fall des QW-Systems mit  $m = 10$  Lagen beträgt der Abstand also  $\overline{\Gamma L}/10 \approx 0,099 \text{ \AA}^{-1}$ . Der ( $\nu = 1$ )-Zustand sollte also bei  $k_{\perp} = \frac{9}{10} \overline{\Gamma L} \approx 0,892 \text{ \AA}^{-1}$  liegen. Aus der experimentell bestimmten Dispersion kann man unter Berücksichtigung der Fehlerintervalle ablesen,

#### 4 Quantentopf-Zustände in dünnen Yb(111)-Filmen

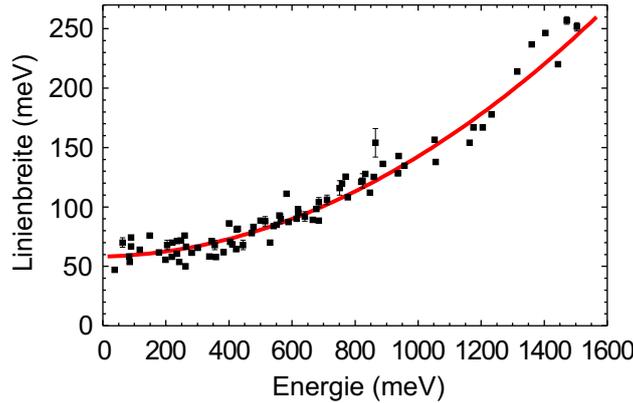


Abbildung 4.7: Linienbreite der QW-Zustände als Funktion der Energie. Der parabolische Fit 2. Ordnung (rot) hat einen vernachlässigbaren linearen Term.

daß der QW-Zustand eine Energie zwischen 50 und 200 meV haben muß. Ein Vergleich mit Abb. 4.6(a) zeigt, daß dies bei 10 ML nur für den in dunkelblau markierten QW-Zustand gilt. Somit ist dieser als ( $\nu = 1$ )-Zustand identifiziert. Genauso kann gezeigt werden, daß für eine Schichtdicke von 10 ML der Zustand  $\nu = 2$  bei 400...500 meV liegen muß, was dem hellblauen Verlauf entspricht usw. Abb. 4.6(a) zeigt also von unten nach oben die QW-Zustände mit  $\nu = 1...7$ .

Die letzte Unbekannte in Gl. 2.16, die Reflexionsphase  $\delta$ , kann nun durch Einsetzen aller zuvor bestimmten Werte leicht ausgerechnet werden. Der Inset in Abb. 4.6(b) zeigt, daß sie sich für verschiedene Energien kaum ändert und in guter Näherung konstant ist:  $\delta = -0,6 \pm 0,4$  (jedoch ist zu betonen, daß der Wert nur unter der Annahme gilt, daß die angegebene Schichtdicke korrekt ist, vgl. Diskussion des systematischen Fehlers in Kap. 4.2). Daraus läßt sich folgern, daß sich die Symmetrielücke des W-Substrats und damit auch die Hybridisierung zwischen Yb- und W-Orbitalen an der Grenzfläche im betrachteten Energie-Intervall kaum ändert.

Die Auswertung der Tunnelspektren mit Lorentzkurven liefert neben der Energieposition der QW-Zustände auch die Linienbreite (bzw. inverse Lebensdauer) als Funktion der Energie. Abb. 4.7 zeigt das Ergebnis für alle Spektren. Trotz einer verhältnismäßig großen Streuung von  $\pm 10$  meV erkennt man deutlich einen Trend der Energieabhängigkeit. Ein parabolischer Fit 2. Ordnung (rote Kurve) ergibt einen Offset von  $(58 \pm 3)$  meV bei  $E_F$ . Der lineare Beitrag ist mit  $(0,006 \pm 0,011)$  vernachlässigbar, so daß der Hauptanteil der Energieabhängigkeit quadratischer Natur ist:

$$\Delta E(E) = (58 \pm 3) \text{ meV} + (0,079 \pm 0,008) \text{ eV}^{-1} \cdot (E - E_F)^2 . \quad (4.1)$$

Drei verschiedene Beiträge können zur Linienbreite beitragen:  $e-e$ -Streuung, welche eine quadratische Energieabhängigkeit zeigt (s. Kap. 2.2.1),  $e-ph$ -Streuung, die im betrachteten Energiebereich einen konstanten Beitrag liefert (s. Kap. 2.2.2), und Transmission von Elektronen ins Wolframsubstrat (s. Kap. 2.3). Zusätzlich kann die Banddispersion parallel zur Oberfläche die spektrale Form ähnlich dem in Kap. 2.4.2 vorgestellten Modell asymmetrisch verbreitern. Da aber die  $k_{\parallel}$ -Dispersion des  $\Gamma - L$ -Bandes von Yb sehr flach ist (s. Abb. 2.1(f)) und die gezeigten Tunnelspektren praktisch symmetrische Peaks zeigen, kann dieser Effekt hier vernachlässigt werden.

#### 4.4 Einfluß der Topographie auf die Tunnelspektren

Die rein quadratische Zunahme der Linienbreite mit der Energie läßt vermuten, daß sich hier die  $e$ - $e$ -Streuung zeigt. Bei einer endlichen Transmission (bzw. Reflektivität  $R < 1$ ) an der Yb-W-Grenzfläche wäre nach Gl. 2.18 eine Zunahme der Linienbreite proportional zur inversen Schichtdicke zu erwarten. Daß eine Schichtdickenabhängigkeit im betrachteten Bereich 9...23 ML im Rahmen der Streuung nicht zu erkennen ist, kann mit einer sehr kleinen Transmission erklärt werden. Nimmt man  $R = 1$  an, so wäre die gemessene Linienbreite identisch mit der Lebensdauer-Verbreiterung:  $\Delta E = \Gamma$  [Pag99]. Der relativ große Offset von 58 meV in Gl. 4.1 kann allerdings kaum der  $e$ - $ph$ -Streuung allein zugeordnet werden. Bei einer Debye-Temperatur von ca. 120 K und unter der Annahme einer maximal ähnlich großen effektiven Massenerhöhung  $\lambda \sim 1,3$  wie im Fall von Gd(0001) (s. Kap. 6.3) wäre nach Gl. 2.5 eine Linienbreite  $\Gamma_{e-ph} \leq 30$  meV zu erwarten. Somit liegt die Vermutung nahe, daß die Transmission doch zu einem geringen Anteil zur gemessenen Linienbreite beiträgt. Durch die relativ große Streuung von  $\pm 10$  meV besteht die Möglichkeit, daß eine schwache Schichtdicken-Abhängigkeit der Linienbreite zwar nicht nachweisbar, aber dennoch vorhanden ist. Eine Abschätzung läßt im Extremfall eine Reflektivität  $R = 0,8$  zu. Dies würde nach Gl. 2.18 zu  $\Delta E \approx 1,66 \cdot \Gamma$  führen. Der  $2\beta$ -Faktor in Gl. 2.5 verringert sich gegenüber dem quadratischen Vorfaktor in Gl. 4.1 entsprechend. Nach Gl. 2.6 folgt daraus ein Wert für den Elektronendichte-Parameter von  $r_s = 3,2 \pm 1,4$  in guter Übereinstimmung mit dem theoretischen Wert  $r_s = 3,21$  [Qui58, Ech00]. Der Offset der Lebensdauer-Verbreiterung beträgt dann  $(35 \pm 2)$  meV.

Diese Resultate deuten also darauf hin, daß die Energieabhängigkeit der Linienbreite im wesentlichen durch die  $e$ - $e$ -Streuung erklärt werden kann, wobei an der Grenzfläche eine schwache Hybridisierung des Yb-Bandes mit den Bändern des W-Substrats auftritt und zu einer Transmission von maximal 20% führt. Die Übereinstimmung des experimentellen mit dem theoretischen Elektronendichte-Parameter läßt den Schluß zu, daß die Elektronenbewegung im betrachteten Yb-Band als isotrop und quasifrei angesehen werden kann, denn dies sind Bedingungen für die Gültigkeit der Theorie von Quinn und Ferrell [Qui58].

## 4.4 Einfluß der Topographie auf die Tunnelspektren

Bei einer gestuften Kristalloberfläche mit nebeneinander liegenden Terrassen von unterschiedlicher Schichtdicke stellt sich die Frage, wie sich der Übergang von einem QW-System zum anderen vollzieht. Abb. 4.8(a) zeigt ein STM-Bild, in welchem eine Stufenkante quer von links unten nach rechts oben durch das Bild läuft (markiert mit blauer Punktlinie). Der Höhenunterschied zwischen den beiden Terrassen beträgt ca. 1 Å, die Ursache für die Kante ist also eine Stufe im Wolframsubstrat (s. Kap. 4.1).

Weit entfernt von der Kante erscheinen die ungestörten Tunnelspektren der beiden Terrassen, deren lokale Schichtdicken durch Vergleich mit Abb. 4.4 identifiziert werden können zu 20 ML (grün in Abb. 4.8(b)) und 21 ML (rot). Eine Messung genau auf der Kante (blau) führt zu einem Spektrum, dessen QW-Zustände genau zwischen denen des 20-ML- und des 21-ML-Spektrums liegen. Die schwarze Kurve entspricht dem Mittelwert des 20-ML- und 21-ML-Spektrums. Sie kommt dem gemessenen Spektrum auf der Kante sehr nah. Dies würde dem Fall entsprechen, daß an der Kante beide QW-Systeme unabhängig existieren und sich nicht beeinflussen. Denkbar ist aber auch

#### 4 Quantentopf-Zustände in dünnen Yb(111)-Filmen

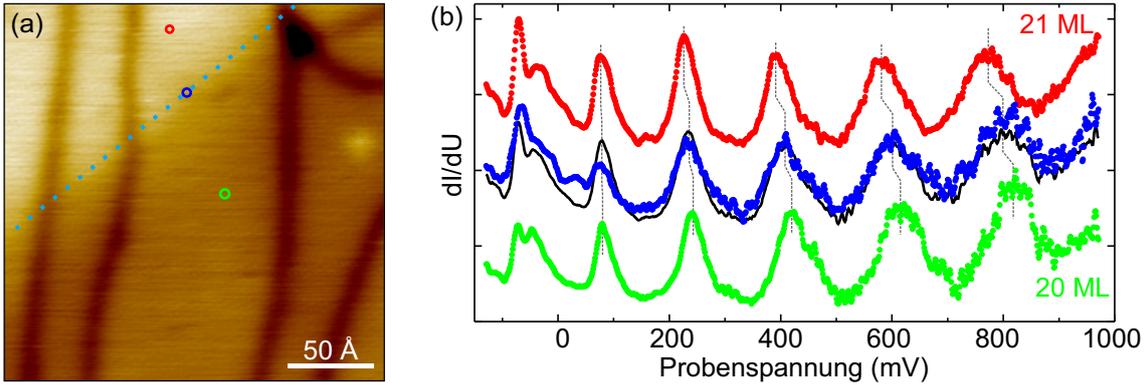


Abbildung 4.8: (a) STM-Aufnahme von Yb(111) mit einer quer durch das Bild verlaufenden Stufenkante ( $-1$  V,  $1$  nA), welche eine  $21$  ML dicke Terrasse (links oben) von einer  $20$  ML dicken Schicht (rechts unten) trennt. Die dunklen Gräben sind Dislokationslinien. Die farbigen Kreise markieren die Stellen, an denen die in (b) gezeigten Tunnelspektren aufgenommen wurden: auf der  $21$ -ML-Terrasse (rot), der  $20$ -ML-Terrasse und im Zentrum der Stufenkante (blau). Zum Vergleich ist der Mittelwert aus den  $20$ -ML- und  $21$ -ML-Spektren gezeigt (schwarz).

die Möglichkeit, daß die Stufenkante keine scharfe Kante ist, sondern ein Übergang mit einer größeren lateralen Ausdehnung. Dann würde sich auch die lokale Schichtdicke fließend ändern und zu einer kontinuierlichen Verschiebung der QW-Zustände führen. Da der Unterschied der QW-Zustände relativ klein ist, kann aus den Ergebnissen nicht geschlossen werden, welcher Prozeß hier auftritt. Die erstgenannte Möglichkeit wurde an Pb-Quantenkeilen auf einem Siliziumsubstrat gezeigt [Che00]. Ein Linienscan senkrecht zur Stufenkante (Abb. 4.9 oben) zeigt dagegen, daß hier die zweite Variante denkbar ist. Der topographische Übergang zwischen den beiden Terrassen findet auf einer relativ großen Länge von ca.  $60$  Å statt. Im Vergleich dazu ist die Änderung der QW-Zustände entlang dieses Übergangs ebenfalls kontinuierlich und auf derselben Längenskala. Abb. 4.9 zeigt unten stellvertretend für das gesamte Spektrum die Veränderung der Energie des QW-Zustandes mit der Quantenzahl  $\nu = 6$  als Funktion des Abstandes von der Mitte der Stufenkante

Die ungewöhnliche Ausdehnung der Stufenkante über einen so großen Bereich kann dadurch erklärt werden, daß der Unterschied von  $1$  Å deutlich kleiner ist als eine Monolage und daher eher als Stufenversetzung angesehen werden muß. Mit zunehmender Schichtdicke des wachsenden Kristalls wird diese Versetzung immer besser kompensiert, so daß der Übergang ausgeschmiert erscheint [Kit96]. Bei dem  $130$  ML dicken Yb-Film lassen sich deshalb auch keine Stufenkanten dieser Art messen.

Auch die Dislokationslinien sowie die schmalen hcp-Domänen verändern die Lage der QW-Zustände. Abb. 4.10(c) zeigt an den in (a) markierten verschiedenen Positionen aufgenommene Tunnelspektren einer  $21$  ML hohen Terrasse. Während auf den im Linienscan hochgelegenen fcc-Domänen das bereits bekannte Spektrum gemessen wird (rot), zeigen Spektren auf den niedrigeren hcp-Bereichen eine Verschiebung der QW-Zustände um  $(9 \pm 3)$  meV zu höheren Energien (grün). Auf den Dislokationslinien ist die Verschiebung mit  $(21 \pm 5)$  meV sogar noch größer (blau). Qualitativ kann diese Verschiebung durch die Änderung der effektiven Schichtdicke entsprechend dem abge-

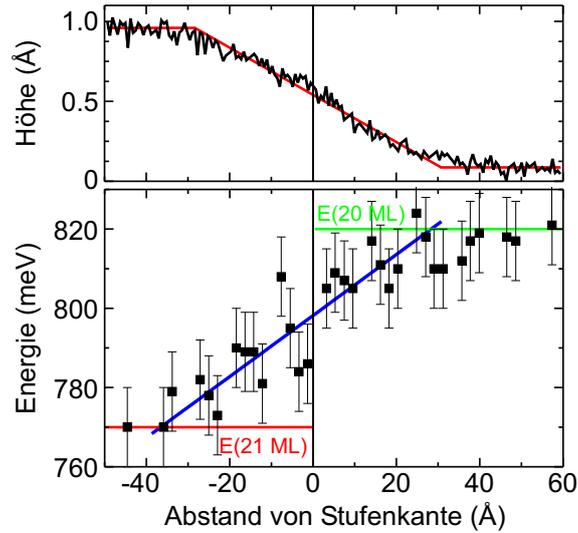


Abbildung 4.9: Vergleich des Höhenprofils der (21→20 ML)-Stufenkante ( $-1\text{ V}$ ,  $1\text{ nA}$ ) mit der Energie des ( $\nu = 6$ )-QW-Zustandes als Funktion des lateralen Abstands von der Stufenkante.

bildeten Höhenprofil verstanden werden. So ist nach Abb. 4.6(a) bei einer um  $0,25\text{ \AA}$  geringeren Schichtdicke eine um ca.  $5\text{ meV}$  höhere QW-Energie zu erwarten. Die um  $0,6\text{ \AA}$  tiefer liegenden Dislokationen würden eine Verschiebung um ca.  $11\text{ meV}$  erklären können. Diese Erwartungen sind mit den gemessenen Änderungen verträglich. Während diese einfache Betrachtung eine plausible Erklärung für die beobachtete Verschiebung der QW-Zustände ist, sind auch andere Ursachen möglich. So ist z.B. denkbar, daß die Rekonstruktion an der Oberfläche die Potentialbarriere und damit die Reflexionsphase  $\delta$  modifiziert.

Ähnlich wie der Übergang zwischen zwei Terrassen unterschiedlicher Schichtdicke erscheint die laterale Änderung vom spektroskopischen Signal der Dislokationen zu dem der fcc-Domänen als kontinuierliche Verschiebung, welche mit dem topographischen Höhenprofil einhergeht. Abb. 4.10(b) zeigt, daß die Ausdehnung ( $14 \pm 1$ )  $\text{\AA}$  beträgt. Die QW-Zustände scheinen also lateral stark lokalisiert zu sein, was angesichts der flachen Dispersion parallel zur Oberfläche (s. Abb. 2.1(f)) nicht verwunderlich ist (vgl. auch Kap. 6.2).

## 4.5 Fazit

Die Rastertunnelspektroskopie auf unterschiedlich dicken Schichten von Yb/W(110) zeigt, daß sich in diesem System *quantum-well*-Zustände ausbilden. Da die Filme nicht perfekt flach wachsen, können allein auf einem Film mehrere QW-Systeme unterschiedlicher Schichtdicke beobachtet werden. Dies hat auch zur Folge, daß ihre Messung eine Meßmethode mit hoher lateraler Auflösung voraussetzt, was vermutlich nur für STS der Fall ist.

Die Analyse der QW-Zustände ermöglicht die Berechnung der Dispersion des beteiligten Yb-Volumenbandes. Durch die hohe Energieauflösung (bei  $T = 11\text{ K}$ ) kann zudem die Linienbreite ausgewertet werden. Bei einer Transmission ins W-Substrat zwischen

#### 4 Quantentopf-Zustände in dünnen Yb(111)-Filmen

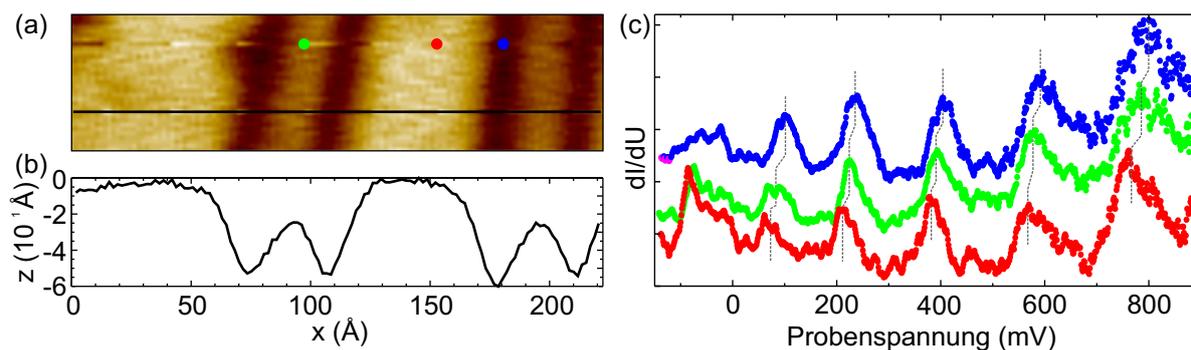


Abbildung 4.10: (a) Topographie einer 21 ML hohen Terrasse mit wechselnder fcc- (helle Bereiche) und hcp-Stapelung (mittlerer Kontrast), die durch Dislokationslinien (dunkel) getrennt sind ( $-1 \text{ V}$ ,  $1 \text{ nA}$ ). Das Höhenprofil entlang der schwarzen Linie ist in (b) dargestellt. Die hcp-Bereiche liegen ca.  $0,25 \text{ Å}$  niedriger als die fcc-Domänen, die Dislokationen zeigen eine Tiefe von ca.  $0,6 \text{ Å}$ . (c) Rastertunnelspektren an den in (a) markierten Orten: auf einer fcc-Domäne (rot), einer hcp-Domäne (grün) und einer Dislokation (blau).

0 und 20% kann die Energieabhängigkeit der Lebensdauer-Verbreiterung durch  $e$ - $e$ -Streuung erklärt werden.

Der laterale Übergang zwischen zwei benachbarten QW-Systemen scheint kontinuierlich stattzufinden und korreliert mit topographischen Änderungen der Oberfläche. Dies weist darauf hin, daß die QW-Zustände entlang der Oberfläche stark lokalisiert sind.

Ausblickend sollte in nachfolgenden Experimenten die Untersuchung auf Schichtdicken von 1...8 ML ausgedehnt werden. Dadurch kann die Angabe der Schichtdicke verifiziert werden. Außerdem würde gerade bei dünnen Filmen eine endliche Transmission in das W-Substrat zu signifikanten Schichtdickenabhängigkeiten der Linienbreite führen, die Transmission kann dann also quantifiziert werden. Schließlich ist die weitere Entwicklung der Domänenstruktur in der Topographie mit abnehmender Schichtdicke interessant, weil die Verspannung zunimmt.

Als weiteres Experiment sei eine temperaturabhängige Messung der Linienbreiten vorgeschlagen, welche eine quantitative Angabe des Beitrags der  $e$ - $ph$ -Streuung zur inversen Lebensdauer ermöglicht. Zusammen mit den bereits vorhandenen Daten bei tiefer Temperatur kann somit die Dynamik des senkrechten Yb-Volumenbandes vollständig beschrieben werden. Die QW-Zustände ermöglichen darüber hinaus die Untersuchung der Energieabhängigkeit der  $e$ - $ph$ -Streuung. Während diese in der Vergangenheit oberhalb der Debye-Energie eigentlich als energieunabhängig angenommen wurde, zeigen aktuelle Ergebnisse das Gegenteil ([Gay03], s. Kap. 6.3). Entscheidende Streumechanismen sind im Detail offensichtlich noch nicht ausreichend verstanden. Mit Yb/W(110) liegt ein System vor, an dem sehr genau die Dynamik eines Bandes über einen weiten Bereich energie- und temperaturabhängig mittels STS gemessen werden kann.