

# Elektronische Struktur niederdimensionaler Systeme an Oberflächen

D i s s e r t a t i o n

eingereicht im  
Fachbereich Physik  
der Freien Universität Berlin

von

Diplom-Physiker  
**Martin Hansmann**

aus

Mettmann

2003

Die vorliegende Doktorarbeit wurde am Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft durchgeführt.

- 1. Gutachter:** Prof. Karsten Horn, Ph.D.
  - 2. Gutachter:** Prof. Dr. Karl-Heinz Rieder
- Tag der Disputation:** 18. Juni 2003

# Inhaltsverzeichnis

Kurzfassung	i
Abstract	iii
Abkürzungsverzeichnis	vii
<b>1 Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2 Niederdimensionale Strukturen an Oberflächen</b>	<b>3</b>
2.1 Elektronische Zustandsdichte . . . . .	3
2.1.1 Zustandsdichte in 3D . . . . .	3
2.1.2 Zustandsdichte in 2D . . . . .	4
2.1.3 Zustandsdichte in 1D und 0D . . . . .	5
2.2 Erzeugung metallischer Strukturen . . . . .	6
2.3 Atomare Ketten auf Oberflächen . . . . .	7
2.3.1 Selbstorganisierte Ketten und Metallizität . . . . .	7
2.3.2 Ketten durch atomare Manipulation . . . . .	8
2.4 Vizinale Oberflächen . . . . .	9
2.5 Masken für eindimensionale Strukturen . . . . .	10
2.5.1 Gestufte Oberflächen als Masken . . . . .	11
2.5.2 Chemische Masken . . . . .	12
<b>3 Rastertunnelmikroskopie: Theorie und Experiment</b>	<b>13</b>
3.1 Prinzip des Rastertunnelmikroskops . . . . .	13
3.2 Theorie des Tunnelstroms . . . . .	14
3.2.1 Der quantenmechanische Tunneleffekt . . . . .	14
3.2.2 Tunnelmodell von Tersoff und Hamann . . . . .	16
3.3 Rastertunnelspektroskopie . . . . .	18
3.3.1 Experimentelle Realisierung der STS . . . . .	19
3.3.2 STS an Oberflächenzuständen: Wellen und $\mathbf{k}$ -Raum . . . . .	20
3.4 Der Messaufbau: Ein Tieftemperatur-STM . . . . .	24
3.4.1 Gesamtsystem und thermische Ankopplung . . . . .	25
3.4.2 STM und STM-Kammer . . . . .	26
3.4.3 Schwingungsdämpfung . . . . .	27

<b>4</b>	<b>Ba/Si(111): Ein quasi-1D Adsorbatsystem</b>	<b>29</b>
4.1	Alkalimetall-induzierte (3×1)-Rekonstruktion . . . . .	29
4.2	Probenpräparation und höhere Bedeckungen . . . . .	32
4.2.1	Präparation der Si(111)-(7×7)-Substrate . . . . .	32
4.2.2	Präparation der Ba-induzierten Rekonstruktion . . . . .	33
4.2.3	Rekonstruktionen bei höheren Bedeckungen . . . . .	35
4.3	Struktur der Ba/Si(111)-(3×2)-Rekonstruktion . . . . .	36
4.4	Phasenfluktuationen der Ba-Kettenkonfiguration . . . . .	38
4.5	Zusammenfassung . . . . .	42
<b>5</b>	<b>Cu(554): Elektronische Struktur einer vizinalen Metalloberfläche</b>	<b>45</b>
5.1	Präparation und Morphologie von Cu(554) . . . . .	46
5.1.1	Atomistisches Modell . . . . .	46
5.1.2	Präparation . . . . .	47
5.1.3	Morphologie . . . . .	47
5.2	Übergitter- und Confinement-Effekte . . . . .	49
5.2.1	Kronig-Penney-Modell für vizinale Oberflächen . . . . .	51
5.2.2	Lokales Confinement im Quantentopf-Bild . . . . .	53
5.3	Dispersion und Dynamik der Elektronen . . . . .	55
5.4	Schmalere Terrassen: Cu(332) . . . . .	61
5.5	Diskussion der elektronischen Struktur . . . . .	64
<b>6</b>	<b>Feldemissionsresonanzen im Tunnelkontakt</b>	<b>67</b>
6.1	Feldemissionsregime des STM . . . . .	67
6.2	Proben- und Spitzensensitivität der FER . . . . .	70
6.3	Elektronische Struktur oberhalb von $E_{\text{vac}}$ . . . . .	71
6.4	Laterale Effekte: Interferenz und 3D-Charakter . . . . .	75
6.4.1	Defekte und Elektroneninterferenzen . . . . .	75
6.4.2	Modell für die Feldelektroneninterferenz . . . . .	79
6.5	Diskussion und Zusammenfassung des Kapitels . . . . .	81
<b>7</b>	<b>Vermessung von Volumenbandkanten mit dem STM</b>	<b>83</b>
7.1	Abschirmeffekte durch Volumenelektronen . . . . .	83
7.2	Verlauf von Volumenbandkanten im $\mathbf{k}$ -Raum . . . . .	87
7.3	Diskussion der Abbildung von Bandkanten . . . . .	90
<b>8</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>91</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>95</b>
	<b>Danksagung</b>	<b>109</b>
	<b>Lebenslauf</b>	<b>111</b>

# Abkürzungsverzeichnis

0D	nulldimensional
1D	eindimensional
1D-FT	eindimensionale Fourier-Transformation
2D	zweidimensional
2DEG	zweidimensionales Elektronengas
2D-FT	zweidimensionale Fourier-Transformation
3D	dreidimensional
AES	Augerelektronenspektroskopie
AM	Alkalimetall
ARPES	winkelaufgelöste Photoelektronenspektroskopie ( <i>angle-resolved photoelectron spectroscopy</i> )
a.u.	willkürliche Einheiten ( <i>arbitrary units</i> )
CDW	Ladungsdichtewelle ( <i>charge density wave</i> )
DFT	Dichtefunktionaltheorie
$dI/dV$	differentielle Leitfähigkeit, $dI/dV_b(V_b)$
DOS	Zustandsdichte ( <i>density of states</i> )
EAM	Erdalkalimetall
FER	Feldemissionsresonanz
FT-STM	Fouriertransformations-STM
HCC	Honigwabenketten-Kanal [-Modell] ( <i>honeycomb chain-channel</i> )
HREELS	Hochauflösende Elektronenenergieverlustspektroskopie ( <i>high-resolution electron energy loss spectroscopy</i> )
IPES	inverse Photoelektronenspektroskopie
LDA	Lokale-Dichte-Näherung ( <i>local density approximation</i> )
LDOS	lokale Zustandsdichte ( <i>local density of states</i> )
LEED	niederenergetische Elektronenbeugung ( <i>low-energy electron diffraction</i> )
LEED- $I(V)$	$I$ - $V$ -Kurve in LEED
MEIS	mittelenergetische Ionenstreuung ( <i>medium-energy ion scattering</i> )
ML	Monolage
SPA-LEED	Reflexprofilanalyse bei LEED ( <i>spot profile analysis LEED</i> )
STM	Rastertunnelmikroskop ( <i>scanning tunneling microscope</i> )
STS	Rastertunnelspektroskopie ( <i>scanning tunneling spectroscopy</i> )
UHV	Ultrahochvakuum