

# Kurzfassung

In dieser Doktorarbeit werden niederdimensionale Strukturen an Oberflächen mithilfe des Rastertunnelmikroskops (STM) untersucht. Der Schwerpunkt liegt dabei auf der Erzeugung, Charakterisierung und Untersuchung der elektronischen Struktur von mehreren eindimensionalen Systemen.

Ba/Si(111) stellt ein quasi-eindimensionales Adsorbatsystem dar, dessen strukturelle Eigenschaften in der Vergangenheit kontrovers diskutiert wurden. Bei dieser Oberfläche bildet Barium Ketten auf dem rekonstruierten Siliziumsubstrat. Trotz eines pseudo- $(3 \times 1)$ -LEED-Musters zeigt sich im STM, dass die Oberfläche lokal eine  $(3 \times 2)$ -Einheitszelle hat. Zudem wird aus spektroskopischen Untersuchungen deutlich, dass die Oberfläche entgegen der theoretischen Vorhersage halbleitend ist. Basierend auf den STM-Bildern wird ein Modell erarbeitet, um diesen Widerspruch aufzulösen. Die Bariumketten weisen dabei zufällige Phasenfluktuationen zwischen zwei um jeweils eine halbe Einheitszelle verschobenen Konfigurationen auf, die für das  $(3 \times 1)$ -LEED-Bild verantwortlich sind. Dieser Befund wird durch Simulationen und theoretische Rechnungen bestätigt und lässt sich in gleicher Weise auf eine Reihe anderer Adsorbatsysteme übertragen.

Untersuchungen an Cu(554), einer vizinalen Cu(111)-Oberfläche, zeigen, dass im periodischen Stufenpotential sowohl zwei- als auch eindimensionale Confinement-Effekte auftreten. Das Stufen-Übergitter verschiebt den Einsatz des Oberflächenzustands nach oben. Da die Periodizität der Stufen nicht perfekt ist, lassen sich lokale von räumlich ausgedehnten Effekten unterscheiden. In den tunnelspektroskopischen Messungen ist ein starkes Maximum in der lokalen Zustandsdichte zu verzeichnen, dessen Energie von der Terrassenbreite abhängt. Eine Analyse in einem einfachen Quantentopfmodell zeigt, dass die Energie des Maximums der Resonanzbedingung für das Confinement auf der jeweiligen Terrasse genügt. Dispersionsmessungen bestätigen, dass dieses lokale Confinement die elektronische Struktur dominiert. Damit lassen sich Photoemissionsmessungen erklären, die einen Übergang von Terrassen- zu Stufenmodulation mit der Fehlorientierung gefunden haben.

Neben niederdimensionalen Systemen, deren elektronische Struktur vor allem durch Oberflächenzustände bestimmt ist, wird auch die Wechselwirkung von räumlich beschränkten Zuständen mit einer Oberfläche untersucht. Dazu wird das STM im so genannten Feldemissionsregime betrieben, das heißt, dass die Tunnelspannung die Austrittsarbeit der Probe übersteigt. Dadurch können sich gebundene Zustände im Tunnelkontakt bilden. Diese Feldzustände werden benutzt, um die Bandkante der projizierten Volumen-

zustände oberhalb des Vakuumniveaus zu detektieren. Die Feldzustände zeigen auch eine überraschende Wechselwirkung mit der lokalen Defektstruktur der Oberfläche. Die begrenzte laterale Ausdehnung der Feldzustände unter der Spitze muss berücksichtigt werden, um diesen Effekt zu verstehen.

Schließlich werden Messungen an mehreren Edelmetalloberflächen vorgestellt, die zeigen, dass sich die Untersuchung der Dynamik von Elektronen mit dem STM nicht nur auf Oberflächenzustände beschränken muss. Erstmals ist es gelungen, den Verlauf von Volumenbandkanten im reziproken Raum mittels Rastertunnelspektroskopie zu bestimmen.

# Abstract

The *Electronic Structure of Low-Dimensional Systems at Surfaces* is studied by means of scanning tunneling microscopy (STM) in this thesis. It focusses on the preparation and the investigation of the electronic structure of several different one-dimensional systems.

The structural properties of Ba/Si(111), a quasi-one-dimensional adsorbate system, have been controversially discussed in the past. On this surface, barium forms atomic chains on the reconstructed silicon substrate. While LEED exhibits a pseudo-(3×1) pattern, STM shows a local (3×2) periodicity on the surface. Moreover, spectroscopic results indicate that the surface is semiconducting, contrary to theoretical expectations. Based on the STM data, a model is proposed to overcome this apparent discrepancy. The barium chains exhibit random registry shifts between two possible chain configurations which are half a unit cell constant apart. These registry shifts are responsible for the pseudo-(3×1) LEED pattern; the experimental findings are confirmed by simulations and theoretical calculations. It is very likely that the results can be applied to some other systems with a similar adsorbate structure.

Scanning tunneling spectroscopy (STS) studies on Cu(554), a vicinal Cu(111) surface, show that the periodic step structure induces two-dimensional as well as one-dimensional confinement effects. The onset of the surface state is shifted to lower binding energies by the step superlattice. Since the periodicity of the steps is not perfect, local and spatially extended effects can be distinguished. In the STS measurements, a strong peak occurs in the local density of states depending on the terrace width. A simple quantum well model shows that the peak appears whenever electrons comply with the resonance conditions of confinement on the respective terrace. Dispersion studies confirm that the local confinement dominates the electronic structure. This might give an alternative explanation to previous photoemission studies which invoke a transition from terrace to step modulation with decreasing terrace width.

The second part of the thesis extends the study of low-dimensional systems which originate from *surface states* to the *interaction* of confined states with a surface. To achieve this, the STM is operated in the field emission regime, i.e. the bias voltage exceeds the work function of the sample. Since electrons are partially reflected at the surface, they can form confined states in the tunnel gap. These field states are used to detect a band edge of the projected bulk states above the vacuum level. Moreover, the field states interact surprisingly strongly with the local defect structure of the surface. The lateral behavior of the field states must be taken into account to fully understand the interaction

mechanism.

Finally, studies at different noble metal surfaces are presented which show that the investigation of electron dynamics is not limited to surface states in STM. For the first time, the gradient of bulk band edges in reciprocal space is probed by scanning tunneling spectroscopy.