

Kapitel 5

Cu(554): Elektronische Struktur einer vizinalen Metalloberfläche

Atomare Ketten wie in Kapitel 4 stellen sicherlich einen extremen Fall eines eindimensionalen Systems dar. Um ein eindimensionales elektronisches Verhalten und Confinement von Elektronen beobachten zu können, reichen aber unter gewissen Umständen auch Strukturen von einigen Nanometern Breite aus.

Vizinale Oberflächen (siehe Abschnitt 2.4) eignen sich besonders, weil sich die Breite der Strukturen über den Grad der Fehlorientierung frei wählen lässt. Elektronen werden an dem Potential der Stufenkanten reflektiert und sind somit auf die Terrasse beschränkt, was zur Quantisierung der Zustände führt.

Darüber hinaus ist zu berücksichtigen, dass die Stufen-Überstruktur ein zusätzliches *periodisches* Potential darstellt. Photoemissionsstudien an diversen vizinalen Kupferoberflächen zeigen Hinweise auf eindimensionale Zustände [Ort94, Bau00, She01] und Verschiebungen des Oberflächenzustands aufgrund der reduzierten Brillouin-Zone des Stufenübergitters [Sha88, Sán95, Wan97]. Ortega et al. fanden für vizinale Cu(111)-Oberflächen, dass sich die elektronischen Eigenschaften durch die Fehlorientierung einstellen lassen [Ort00]. Auf diese Untersuchungen wird noch näher in Abschnitt 5.4 eingegangen.

Das Confinement der Elektronen im Stufenpotential einer vizinalen Oberfläche wird sich erst bemerkbar machen, wenn die Breite der Terrassen vergleichbar mit der Elektronenwellenlänge ist. In diesem Kapitel werden STM/STS-Messungen an Cu(554), einer vizinalen Cu(111)-Oberfläche, diskutiert. Cu(111) wurde deshalb gewählt, weil der Oberflächenzustand einem idealen freien 2D-Elektronengas sehr nahe kommt. Die Breite der (111)-Terrassen beträgt 21 Å. Vergleicht man diesen Wert mit der Fermiwellenlänge des (111)-Oberflächenzustands ($\lambda_F = 28 \text{ Å}$ [Kev87]), so stellt man fest, dass in erster Näherung nur *ein* gebundener Zustand im Potentialtopf der Stufen mit dieser Wellenlänge existieren kann. Die periodische Überstruktur sollte einen Einfluss auf die elektronische Struktur des Oberflächenzustands haben, da die Kohärenzlänge der Elektronen auf einer flachen (111)-Oberfläche einige Hundert Ångström beträgt [Bür00]. Die Untersuchungen zeigen, dass STM/STS bei tiefen Temperaturen die Trennung dieser Effekte überhaupt erst möglich macht.

5.1 Präparation und Morphologie von Cu(554)

5.1.1 Atomistisches Modell

Cu(111) ist die dichtgepackte Oberfläche eines kubisch-flächenzentrierten (*face-centered cubic*, fcc) Kristalls mit der Gitterkonstanten $a_{\text{Cu}} = 3,61 \text{ \AA}$. Die (111)-Oberfläche hat eine hexagonale Symmetrie, wobei die dichtgepackten Atomreihen entlang der $\langle \bar{1}10 \rangle$ -Richtungen verlaufen. Der Abstand der nächsten Nachbarn beträgt $a_{111} = a_{\text{Cu}}/\sqrt{2} = 2,55 \text{ \AA}$, der Abstand der Reihen zueinander $a_{\text{rr}} = (\sqrt{3}/2)a_{111} = 2,21 \text{ \AA}$.

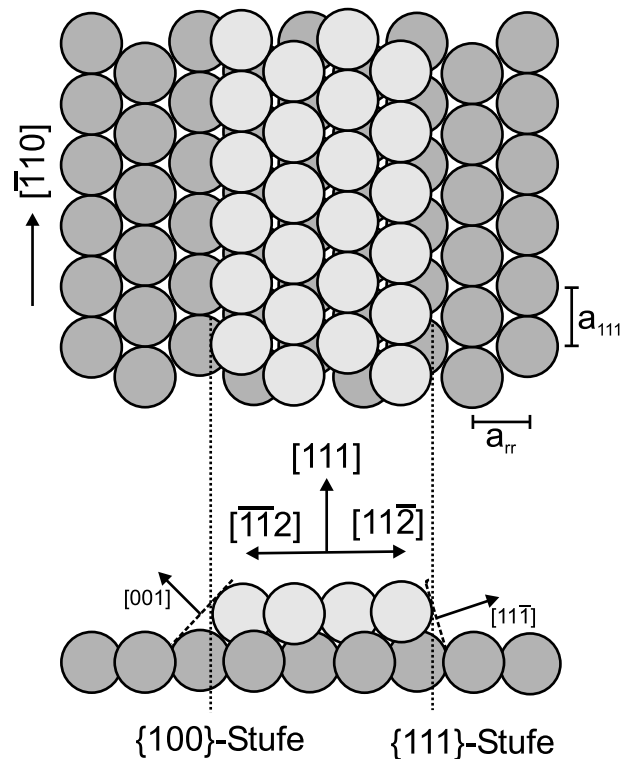


Abbildung 5.1: Modell einer fcc(111)-Oberfläche (nach [Bac02]). Je nach Orientierung entlang $[\bar{1}12]$ oder $[11\bar{2}]$ bilden die Stufen $\{100\}$ - (A-Stufen) oder $\{111\}$ -Minifacetten (B-Stufen). Oben ist eine Draufsicht zu sehen, unten die Seitenansicht. Weiterhin sind die Atomabstände a_{111} und Reihenabstände a_{rr} eingezeichnet.

Es gibt auf der Cu(111)-Oberfläche zwei unterschiedliche Stufentypen (siehe Abbildung 5.1), die aufgrund der fcc-Stapelfolge nur von der Orientierung abhängen. Stufen, die in $[\bar{1}12]$ -Richtung verlaufen, bilden eine $\{100\}$ -Minifacette (A-Stufe), während Stufen in $[11\bar{2}]$ -Richtung $\{111\}$ -Minifacetten sind (B-Stufe). Die Höhe einer monoatomaren (111)-Stufe h beträgt $h = a_{\text{Cu}}/\sqrt{3} = 2,08 \text{ \AA}$.

Cu(554) ist eine vizinale Oberfläche von Cu(111) mit einer Fehlorientierung von $\phi = 5,7^\circ$ in $[11\bar{2}]$ -Richtung; es bilden sich also B-Stufen. Die mittlere Breite L der (111)-Terrassen ergibt sich aus $L = h/\sin \phi = 20,9 \text{ \AA}$ (vergleiche Abbildung 2.5). Dies entspricht $9\frac{1}{3}$ Atomreihen. Abbildung 5.2 zeigt ein atomistisches Modell der Cu(554)-Oberfläche.

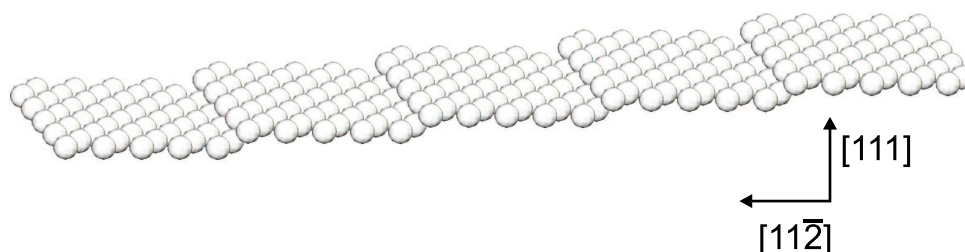


Abbildung 5.2: Modell der Cu(554)-Oberfläche. Die (111)-Terrassen sind durch monoatomare Stufen getrennt. Die Stufen laufen in $[11\bar{2}]$ -Richtung. Die nominale Terrassenbreite entspricht $9\frac{1}{3}$ Atomreihen.

5.1.2 Präparation

Der Cu(554)-Kristall wurde vom Kristalllabor des Fritz-Haber-Instituts hergestellt. Er wurde aus einem Cu(111)-Stab geschnitten und mechanisch sowie elektropoliert. Die Orientierung wurde mittels Laue-Verfahren überprüft.

Die Probe lässt sich durch wiederholte Sputter/Temper-Zyklen im UHV präparieren. Zum Sputtern wurden Ar^+ -Ionen mit 500...1000 eV verwendet; anschließend wurde der Kristall bei etwa 550 °C getempert. Durch dieses Verfahren lässt sich eine Verarmung an Defekten in den oberen Atomschichten erreichen, und man erhält eine reine und geordnete Oberfläche.

Nach der Präparation wird die Probe in das in Abschnitt 3.4 beschriebene Tieftemperatur-STM transferiert. Die Arbeitstemperatur beträgt etwa 5 K.

5.1.3 Morphologie

Die Morphologie der Probe ist durch das regelmäßige Muster der vizinalen Stufen bestimmt (siehe Abbildung 5.3). Neben der geringeren Drift und besseren Energieauflösung besteht ein weiterer Vorteil des Tieftemperatur-STMs darin, dass die Cu-Stufen nicht wie bei Raumtemperatur ein fransenartiges Aussehen haben („Frizziness“) [Fro91]. Diese Beobachtung wurde zunächst auf die hohe Mobilität von Kinkenatomen zurückgeführt, die entlang der Stufen diffundieren [Poe92]. Spätere Untersuchungen konnten aber mit statistischen Argumenten klar machen, dass es sich nicht um ein rein thermodynamisches Phänomen handeln kann, sondern um einen spitzeninduzierten Effekt [Li96, Mug97].

Die eindimensionale Überstruktur der Stufen ist nicht perfekt, da die Terrassenbreite variiert. Auch Kinken treten relativ häufig auf. Das Histogramm in Abbildung 5.4 zeigt die Verteilung in Einheiten des Reihenabstands a_{rr} . Systematische Untersuchungen von vizinalen Cu(111)-Oberflächen mit unterschiedlichen Fehlorientierungen und Stufentypen haben zu dem empirischen Befund geführt, dass Vizinalflächen mit A-Stufen tendenziell regelmäßiger Stufenmuster bilden als Oberflächen (wie Cu(554)) mit B-Stufen [Bac02]. Auf die unterschiedlichen Stufenpotentiale wird noch in der Diskussion der elektronischen

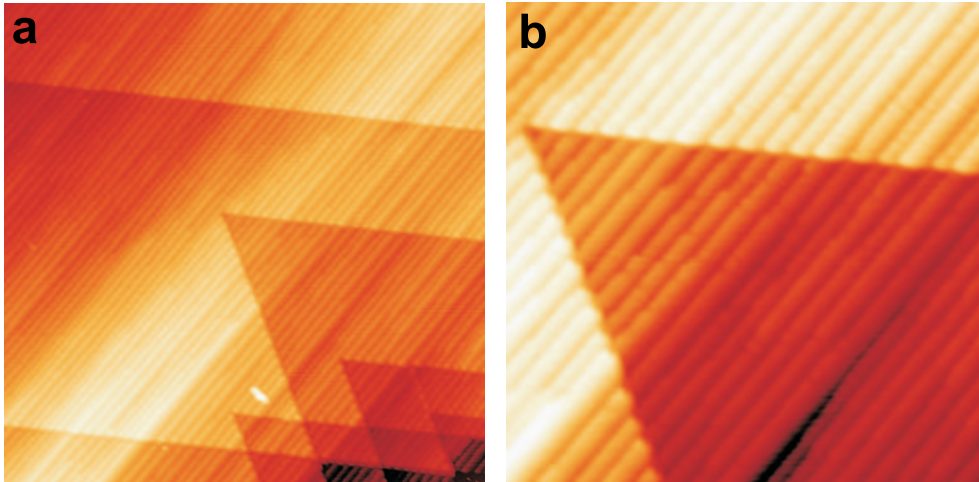


Abbildung 5.3: STM-Bilder von Cu(554). Neben den vizinalen (111)-Stufen, die senkrecht zu der Bilddiagonalen von links oben nach rechts unten laufen, sind noch Stufen der mittleren (554)-Oberfläche erkennen, die im Winkel von 120° dazu liegen. Diese lassen sich als Versetzungen des Kristalls interpretieren. (a) $I = 5 \text{ nA}$, $V_b = -60 \text{ mV}$; $1500 \times 1500 \text{ \AA}^2$. Der Cluster in der Mitte des Bildes ist vermutlich Spitzenmaterial. (b) Ausschnitt etwa aus dem Zentrum von (a). $I = 1,2 \text{ nA}$, $V_b = 60 \text{ mV}$; $600 \times 600 \text{ \AA}^2$.

Struktur eingegangen.

In der Topografie von Abbildung 5.3 sind neben den vizinalen Stufen, die durch die Fehlorientierung der Oberfläche hervorgerufen werden, noch andere Stufen zu erkennen, die im Winkel von 120° dazu liegen. Diese Stufen der Cu(554)-Gesamt-Oberfläche lassen

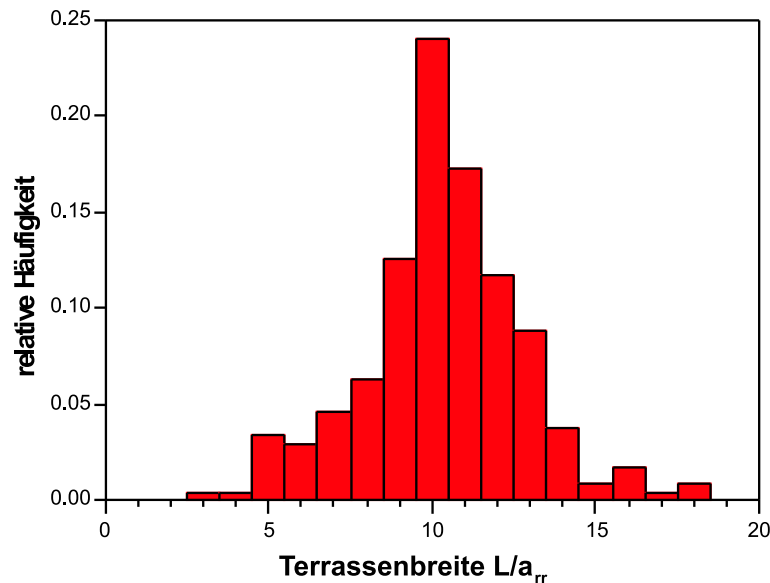


Abbildung 5.4: Verteilung der Terrassenbreite L in atomaren Reihen. Das Maximum ist leicht von 9 zu 10 verschoben; dies könnte aber auf einen Fehler von wenigen Prozent der lateralen STM-Eichung zurückzuführen sein. Es wurden etwa 200 Terrassenbreiten ausgewertet.

sich als Versetzungen des Cu-Kristalls interpretieren. Durch absichtlichen Kontakt der Spitze mit der Probe (erkennbar am abgelagerten Spitzenmaterial in Abbildung 5.3 (a)) lassen sich solche Versetzungen leicht erzeugen. Ein weiterer Hinweis darauf, dass diese (554)-Stufen erst nach der Präparation entstehen, bietet ein Vergleich der (111)-Terrassen oberhalb und unterhalb der (554)-Stufen: natürliche Variationen der Terrassenbreite setzen sich auf beiden Seiten fort.

Die Versetzungen des Kristalls spielen für die Untersuchungen der elektronischen Struktur eine wichtige Rolle, denn sie werden in Abschnitt 5.3 als Streuzentren für das Ausbilden von stehenden Elektronenwellen benutzt (vergleiche Abschnitt 3.3.2).

5.2 Übergitter- und Confinement-Effekte

Die elektronische Struktur lässt sich mittels Rastertunnelspektroskopie (STS) vermessen (vergleiche Abschnitt 3.3). Dazu wurden zunächst dI/dV -Spektren auf verschiedenen Terrassen aufgenommen. Bei diesen Messungen wird der Regelkreis geöffnet und das dI/dV -Signal mithilfe eines Lock-in-Verstärkers in Abhängigkeit der Tunnelspannung gemessen.

In Abbildung 5.5 werden dI/dV -Spektren verschieden breiter Terrassen gezeigt. Die aufgetragenen Kurven sind jeweils mittlere Werte von einigen 10 Spektren, die an verschiedenen Positionen derselben Terrasse aufgenommen wurden. Durch die Mittelung wird der Einfluss lokaler Defekte reduziert. Diese Spektren lassen sich nun mit Messungen auf einer „flachen“(111)-Oberfläche vergleichen (siehe Abbildung 3.4). Das Spektrum der außergewöhnlich breiten Terrasse (225 Å) entspricht dem Verhalten von Cu(111). Der starke Anstieg des Signals bei (-445 ± 15) meV lässt sich auf den Einsatz des Oberflächenzustands zurückführen, in Übereinstimmung mit anderen STS-Messungen [Cro93, Kli00] und hochauflösenden ARPES-Untersuchungen [Rei01].

In den Spektren der schmalen Terrassen sind zwei Dinge bemerkenswert: erstens ist der Einsatz des Oberflächenzustands um 50 meV zur Fermienergie hin verschoben, zweitens taucht ein Maximum in den Kurven auf, das von der Terrassenbreite abhängt.

Diese Veränderungen der Spektren sollen hier im Rahmen von zwei verwandten Modellen diskutiert werden. Die Grundlage von beiden Modellen ist die Vorstellung, dass das Potential der Stufen zur Beschränkung der Elektronenwellenfunktionen führt. In dem einen Fall betrachtet man nur die Reflexion der Elektronen an den Rändern einer (111)-Terrasse, während man im anderen Fall die Periodizität der Stufenstruktur mit in die Überlegungen einbezieht. In beiden Fällen ergibt sich eine Verschiebung der Elektronenenergien, die durch die Terrassenbreite bestimmt ist.

Das Verhalten ist systematisch in Abbildung 5.6 dargestellt, in der die Energie der beiden charakteristischen Merkmale der Spektren, der Einsatz und das Maximum, gegen das inverse Quadrat der Terrassenbreite L aufgetragen ist. Es zeigt sich, dass der Einsatz für alle Terrassenbreiten praktisch um den gleichen Betrag verschoben ist. Einzige Ausnahme sind die beiden größten Terrassen, die mit 39 bzw. 70 Å fast bzw. mehr als doppelt

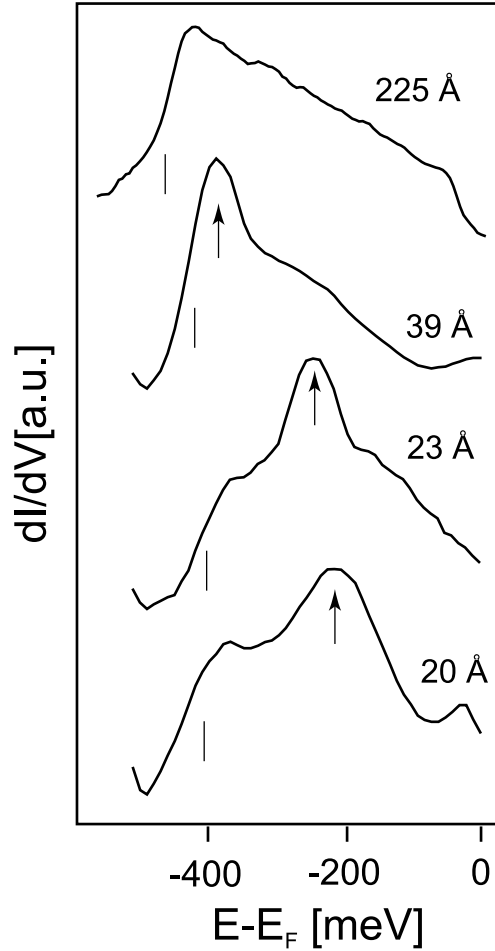


Abbildung 5.5: dI/dV -Spektren von verschiedenen (111)-Terrassen der Cu(554)-Oberfläche. Die Terrassenbreite L ist durch die Zahl rechts über den Spektren gekennzeichnet. Der Einsatz des Oberflächenzustands, der aus dem numerischen Wendepunkt bestimmt wurde, ist durch einen Strich gekennzeichnet. In den Spektren der schmalere Terrassen sieht man ein Maximum, das mit einem Pfeil markiert ist.

so breit sind wie die durchschnittlichen Terrassen. Hier tendieren die Einsatzenergien hin zu dem Wert für die breite Cu(111)-Terrasse von -445 meV.

Die Lage des Maximums in den Spektren hängt dagegen stark von der Breite ab und ist für schmalere Terrassen zu höheren Energien verschoben. Der Grund für die Auftragungsweise E gegen $1/L^2$ ergibt sich aus dem einfachen Quantentopfmodell. Für die Energie eines quasi-freien 2D Elektronengases gilt $E \propto k_{\parallel}^2$ (vergleiche Gleichung 3.13). Kommt es zu einem Confinement senkrecht zu den Stufen, so bilden sich diskrete Energieniveaus, bei denen die Terrassenbreite in erster Näherung einem Vielfachen der halben Wellenlänge entspricht; mit anderen Worten: $k_{\parallel} = 2\pi/\lambda = n\pi/L$ mit der Quantenzahl n .

Bevor die Abhängigkeit der Lage des Maximums von der Terrassenbreite näher untersucht wird, sollen zunächst mögliche Einflüsse des Stufen-Übergitters diskutiert werden.

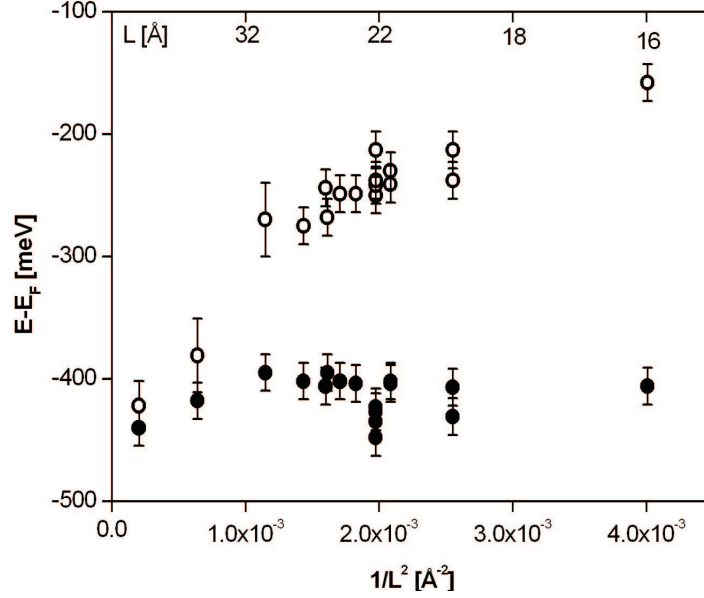


Abbildung 5.6: Einsatz (gefüllte Kreise) und Maximum (offene Kreise) in dI/dV -Spektren von verschiedenen (111)-Terrassen der Cu(554)-Oberfläche in Abhängigkeit der inversen quadratischen Terrassenbreite L . Die Energien von Einsatz und Maximum sind wie in Abbildung 5.5 definiert.

5.2.1 Kronig-Penney-Modell für vizinale Oberflächen

Wie bereits in Kapitel 3 erwähnt, stellt der Cu(111)-Oberflächenzustand ein nahezu ideales quasi-freies zweidimensionales Elektronengas (2DEG) dar. Die regelmäßige Stufenstruktur der vizinalen Cu(554)-Fläche induziert ein zusätzliches periodisches Potential in einer Dimension. Ein solches System lässt sich im Rahmen eines Kronig-Penney-Modells beschreiben [Dav91]. Experimentell wurde dieses Modell zum ersten Mal von García, Sánchez et al. auf STM- und ARPES- Untersuchungen an vizinalen Cu(111)-Oberflächen angewendet [Gar95, Sán95].

Das Übergitter in x -Richtung verursacht eine energetische Verschiebung des Oberflächenbandes um ΔE nach oben, sodass die Dispersionsrelation 3.13 ergänzt werden muss:

$$E(\mathbf{k}) = E_0 + \Delta E + \hbar^2(k_x^2 + k_y^2)/(2m^*) =: E_0 + \hbar^2(q^2 + k_y^2)/(2m^*) \quad . \quad (5.1)$$

Im ungestörten Fall, also ohne Übergitter ($\Delta E = 0$), gilt $q = k_x$.

Der Anteil der Wellenfunktion in x -Richtung ist von der Form $\psi(x) = A \exp(iqx) + B \exp(-iqx)$. Aufgrund der regelmäßigen Stufenpotentiale im Abstand L (d.h. der Terrassenbreite) muss die Wellenfunktion das Bloch-Theorem $\psi(x+L) = \exp(ik_x L)\psi(x)$ erfüllen. Nutzt man noch die Randbedingungen der Wellenfunktion an den Stufenpotentialen aus, so lässt sich die Energieverschiebung ΔE bestimmen:

$$\Delta E = \frac{\hbar^2}{2m^* L^2} [\cos^{-1}(|t|) - \Phi] \quad . \quad (5.2)$$

Der Transmissionskoeffizient t und die Phasenverschiebung Φ sind definiert als

$$t = |t| e^{i\Phi} \quad , \quad (5.3)$$

wobei $|r|^2 + |t|^2 = 1$ gilt. Die Stufenpotentiale lassen sich durch Delta-Funktionen des Typs $U_0 b \delta(x)$ beschreiben. Die Größe $U_0 b$ bezeichnet man als Barrieren-Parameter. Der resultierende Transmissionskoeffizient ist

$$t = \frac{q}{q + iq_0} \quad (5.4)$$

mit $q_0 = m^* U_0 b / \hbar^2$. Durch Einführung der dimensionslosen Größe $\delta = q_0 / q$ und unter Ausnutzung der Gleichungen 5.3 und 5.4 lässt sich Gleichung 5.2 schreiben als

$$\Delta E = \frac{\hbar^2}{2m^* L^2} \left[\cos^{-1} \left(\frac{1}{\sqrt{1 + \delta^2}} \right) - \tan^{-1} (-\delta^2) \right] \quad . \quad (5.5)$$

Experimentell lassen sich die Terrassenbreite L und die energetische Verschiebung des Oberflächenzustands ΔE bestimmen. Somit kann Gleichung 5.5 numerisch nach δ aufgelöst werden; aus δ lassen sich wiederum mit den Gleichungen 5.3 und 5.4 Transmissionskoeffizient t , Phasenverschiebung Φ und Barrierenparameter $U_0 b$ berechnen.

Die Verschiebung des Einsatzes des Oberflächenzustands lässt sich also im Sinne des Kronig-Penney-Modells erklären [Sán95]. Je schmaler die Terrassenbreite, desto stärker wird das Minimum des Oberflächenbandes nach oben verschoben. Bei Cu(554) mit einer mittleren Terrassenbreite von $L = 21 \text{ \AA}$ und einer Energieverschiebung von $\Delta E = 50 \text{ meV}$ ergibt sich eine Transmission von $|t|^2 = 0,48$ und einer Phasenverschiebung von $\Phi = -0,26\pi$. Der Barrierenparameter beträgt $U_0 b = 1,35 \text{ eV\AA}$.

Es bleibt die Frage zu klären, inwieweit sich das Maximum in den dI/dV -Spektren im Rahmen des Kronig-Penney-Modells verstehen lässt. Dieses Maximum ist in den bereits erwähnten STM-Arbeiten an vizinalen Cu(111)-Oberflächen [Sán95, Gar95], die bei Raumtemperatur durchgeführt wurden, nicht beobachtet worden. Dem Übergitter der Stufen lässt sich im reziproken Raum eine Brillouin-Zone in x -Richtung zuordnen, die kleiner ist als die Brillouin-Zone der Cu(111)-Oberfläche. Die Zonengrenze liegt gerade bei $k_x = \pi/L$. An den Zonengrenzen werden die Bänder zurückgefaltet, und es öffnet sich aufgrund des periodischen Stufenpotentials eine kleine Bandlücke („Minigap“) [Hör94b]. Das Abflachen der Bänder am Minigap führt zu einem starken Anstieg der Zustandsdichte bei der Energie $\hbar^2 \pi^2 / (2m^* L^2)$ [Dav91]. Das Modell geht von einem perfekten periodischen Potential aus, während im realen Experiment die Terrassenbreite L variiert. Dennoch wäre zu erwarten, dass sich das Maximum ähnlich wie der verschobene Einsatz des Oberflächenzustands immer an derselben Position für alle Terrassen befindet. Abbildung 5.6 zeigt aber eine klare Abhängigkeit der Position des Maximums von der Terrassenbreite. Es muss sich also um einen lokalen Effekt der einzelnen Terrassen handeln und nicht um ein kollektives Phänomen des Stufen-Übergitters.

5.2.2 Lokales Confinement im Quantentopf-Bild

Die Auftragung von E gegen $1/L^2$ in Abbildung 5.6 wurde durch ein Quantentopfmodell motiviert. Im Fall unendlich hoher Potentialwände gibt es in einem Quantentopf der Breite L Lösungen der Schrödingergleichung für

$$E_n = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^* L^2} . \quad (5.6)$$

An jeder Wand tritt eine Phasenverschiebung um π auf. Gibt man die Energie vor und variiert die Breite L , so tritt der unterste gebundene Zustand ($n = 1$) bei

$$L = \frac{\hbar \pi}{\sqrt{2m^* E_1}} \quad (5.7)$$

auf.

In realen Systemen kann nicht ohne weiteres von unendlichen Potentialen ausgegangen werden. Allgemein lässt sich die Bedingung für einen Quantenzustand im endlichen Potentialtopf durch das Phasenakkumulationsmodell beschreiben [Ech78]:

$$2\pi \cdot n = 2kL + \Phi_1 + \Phi_r , \quad (5.8)$$

das heißt beim Durchlauf durch den Potentialtopf muss die Phase der Elektronenwelle inklusive aller Phasenverschiebungen Φ an beiden Seiten des Potentialtopfs gerade ein Vielfaches von 2π sein (siehe Abbildung 5.7). Eine elementare quantenmechanische Rechnung liefert einen Ausdruck für die Phasenverschiebung eines Teilchens mit der Energie E an einer Potentialbarriere der Höhe V_0 ($V_0 > E$):

$$\Phi = 2 \tan^{-1} \left(\frac{\kappa}{k} \right) \quad \text{mit} \quad \kappa = \sqrt{\frac{2m^*(V_0 - E)}{\hbar^2}} \quad \text{und} \quad k = \sqrt{\frac{2m^* E}{\hbar^2}} . \quad (5.9)$$

STM-Untersuchungen zeigen, dass die Streupotentiale von auf- und absteigenden Stufen unterschiedlich sind [Bür98]. Bezogen auf unser Problem der Position der Maxima in

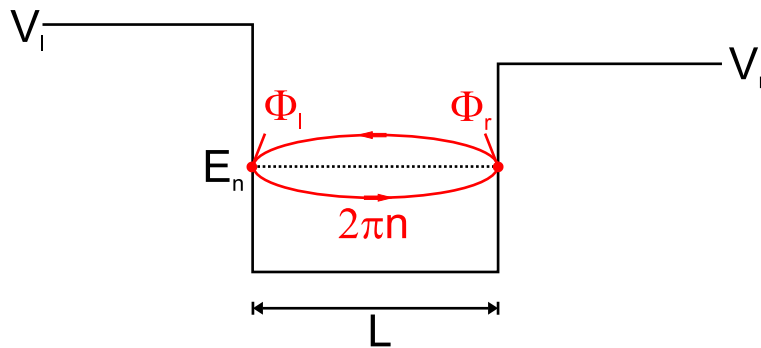


Abbildung 5.7: Phasenakkumulationsmodell. Dargestellt ist ein endlicher Potentialwall mit den Potentialen V_l und V_r und der Breite L . Diskrete Zustände mit der Energie E_n treten genau dann auf, wenn die Gesamtphase inklusive der Phasenverschiebungen Φ_l und Φ_r ein Vielfaches von 2π ist.

den dI/dV -Spektren reicht es aber aus, Φ_1 und Φ_r durch eine mittlere Phasenverschiebung Φ abzuschätzen. Für $n = 1$ lässt sich dann Gleichung 5.8 als

$$L = \frac{\hbar \left[\pi - 2 \tan^{-1} \left(\sqrt{\frac{V_0 - E_1}{E_1}} \right) \right]}{\sqrt{2m^* E_1}} \quad (5.10)$$

schreiben (vergleiche Gleichung 5.7). Die Gleichung wird jetzt benutzt, um die Lage der Maxima zu modellieren (siehe Abbildung 5.8). Als Energie E_1 wird dabei die Position des Peaks relativ zum Einsatz des Oberflächenzustands auf der jeweiligen Terrasse genommen. Die Barrierenhöhe V_0 dient als Fitparameter. Das Ergebnis des Fits ($V_0 = 95$ keV) zeigt, dass von totalem Confinement auszugehen ist.

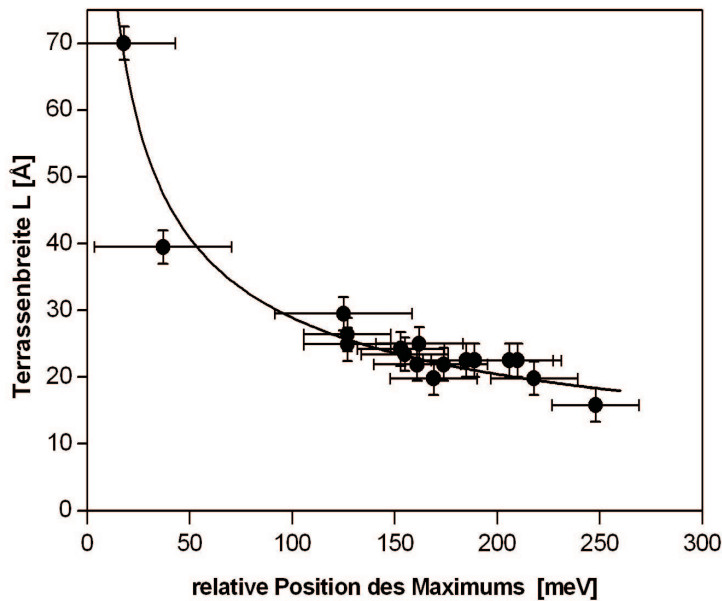


Abbildung 5.8: Breite der Terrassen L in Abhängigkeit der relativen Position der Maxima zur Einsatz-Energie. Die Kurve ist ein Fit gemäß Gleichung 5.10 mit V_0 als Fitparameter. Man erhält $V_0 = 95$ keV.

Dieser Befund ist überraschend, denn er steht im Widerspruch zu den Schlussfolgerungen, die aus der Betrachtung im Kronig-Penney-Modell gezogen wurden. Dort deutete der errechnete Transmissionsfaktor von 0,48 eher auf relativ transparente Stufen hin. Eine mögliche Erklärung liegt in dem Fit selber: Abbildung 5.8 zeigt, dass das Hauptgewicht der Messpunkte um die mittlere Terrassenbreite liegt. Fehler der besonders breiten oder schmalen Terrassen machen sich deshalb stark im Ergebnis von V_0 bemerkbar. Physikalisch gesehen ist eine sehr hohe Potentialbarriere aber nicht gänzlich unmöglich. Photoemissionsmessungen an Au(788), einer vizinalen Au(111)-Oberfläche, weisen darauf hin, dass in diesem System totales Confinement vorliegt, da das Oberflächenband vollständig in diskrete Energieniveaus aufgespalten ist [Mug01]. Für Cu(554) lässt sich aber grundsätzlich feststellen, dass die effektiven Potentialbarrieren der Stufen relativ hoch sind. Dadurch spielt die lokale Beschränkung der Elektronen auf die Terrasse eine große Rolle.

5.3 Dispersion und Dynamik der Elektronen

Das Zusammenspiel von Stufenüberstruktur und lokalem Confinement wird durch Untersuchungen zur Dynamik der Elektronen auf der Cu(554)-Oberfläche besser verständlich. Die Dispersion lässt sich mithilfe von dI/dV -Bildern bestimmen. In der Nähe von Defekten werden in diesen Aufnahmen die Muster stehender Elektronenwellen sichtbar (vergleiche Abschnitt 3.3.2). Aus den Oszillationen kann die Wellenlänge der Elektronen bei der Energie eV_b relativ zum Fermi-niveau bestimmt werden.

Als Streuzentren werden die bereits in Abschnitt 5.1 erwähnten Versetzungen des Kristalls benutzt, die sich als Stufen der Cu(554)-Oberfläche interpretieren lassen (siehe Abbildung 5.9 (a)). In den dI/dV -Bildern von Cu(554) — wie in dem in Abbildung 5.9 (b) gezeigten Beispiel für $V_b = -57$ meV — erscheinen die Oszillationen anders und weniger klar als auf ausgedehnten Cu(111)-Terrassen (siehe Abb. 3.5). Die Stufenüberstruktur führt zu einer Diskretisierung der Wellenfronten, sodass sie nur entlang der schmalen (111)-Terrassen ausgewertet werden können. Aus einem Profil der Wellenmuster (Abb. 5.9 (c)) wird die Elektronenwellenlänge bestimmt; aus der Variation der Oszillationen mit der Energie lässt sich die Dispersion ableiten. Die experimentelle Vorgehensweise ist allerdings umgekehrt. In einem Linienscan entlang der (111)-Terrasse wird an jedem Punkt ein Spektrum aufgenommen, um so eine räumliche Auflösung des dI/dV -Signals zu erreichen.

Abbildung 5.10 (a) zeigt das Resultat einer solchen Messung. Man erkennt den Einsatz des Oberflächenzustands sowie die abnehmende Wellenlänge mit zunehmender Energie. Durch eine eindimensionale Fourier-Transformation (1D-FT) lässt sich die Ortsraum-Information der x -Achse in eine k -Raum-Information umwandeln (vgl. Abschnitt 3.3.2). Die Auflösung im reziproken Raum hängt in solchen Messungen nicht von der Dichte der Punkte des Linienscans ab, sondern von der Gesamtlänge des Scans im Realraum. Die Dispersionskurve im k -Raum weist das Verhalten von quasi-freien Elektronen auf (Abbildung 5.10 (b)). Die Intensitätsmaxima lassen sich nun mit einer Parabel anfitten, woraus eine effektive Masse von $m^* = 0,45 m_e$ bestimmt werden kann.

Die vizinale Stufenüberstruktur lässt die Wellenfronten als kreisförmige Erhebungen erscheinen. Dadurch ist die Streugeometrie nicht ohne weiteres ersichtlich. Prinzipiell sind zwei Szenarien denkbar (siehe Abbildung 5.11).

Erstens könnten die Elektronen vollständig im Potential der (111)-Stufen gebunden sein. Dann wirken die (111)-Terrassen praktisch als Wellenleiter, sodass sich stehende Elektronenwellen entlang der Stufen ausbilden. In diesem Fall stimmen Messrichtung und Streugeometrie überein, da die Richtung des Linienscans und der Wellenvektor der zurückgestreuten Elektronen parallel sind. Man kann erwarten, die physikalisch echte Wellenlänge und damit die korrekte Dispersion zu messen.

Zweitens ist es aber auch möglich, dass die Elektronen sich auf der gesamten (554)-Oberfläche bewegen können. Die Wellenfronten sollten dann parallel zur Versetzung laufen, nur unterbrochen von der Überstruktur der vizinalen Stufen. Messrichtung und Wellenvektor schließen so einen Winkel von 60° ein, und man misst eine *Projektion* der

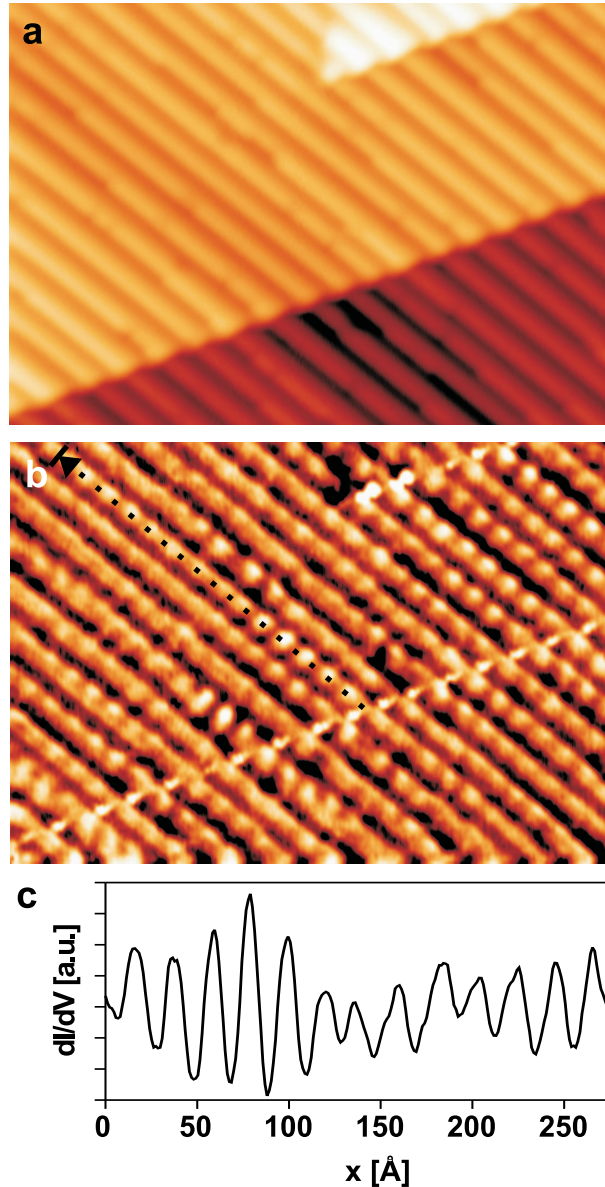


Abbildung 5.9: (a) Topografie der Cu(554)-Oberfläche in der Nähe von Versetzungen („(554)-Stufen“). Die vizinalen (111)-Stufenkanten laufen von links oben nach rechts unten. $I = 5,8 \text{ nA}$, $V_b = -380 \text{ mV}$; $440 \times 310 \text{ \AA}^2$. (b) dI/dV -Bild (Regelkreis geschlossen) desselben Gebiets wie (a) bei $V_b = -57 \text{ mV}$. Aufgrund der Stufenüberstruktur erscheinen die Muster der stehenden Elektronenwellen als kreisförmige Erhebungen. (c) Ein Profil entlang des Pfeils in (b). Aus solchen Messungen lässt sich die Wellenlänge bestimmen. Die Variation der Amplitude wird vermutlich durch Kinken o.ä. der vizinalen Stufen verursacht.

Wellenlänge. Diese zu große Wellenlänge führt in der Dispersionsmessung zu einer zu kleinen effektiven Masse. Der Effekt beträgt etwa 14 %.

Zunächst kann nicht zwischen den beiden Fällen unterschieden werden. Photoemissionsmessungen auf Cu(332) zeigen aber, dass die effektive Masse senkrecht zum Stufenübergitter (das heißt entlang der Terrassen) unverändert gegenüber Cu(111) ist [Bau00].

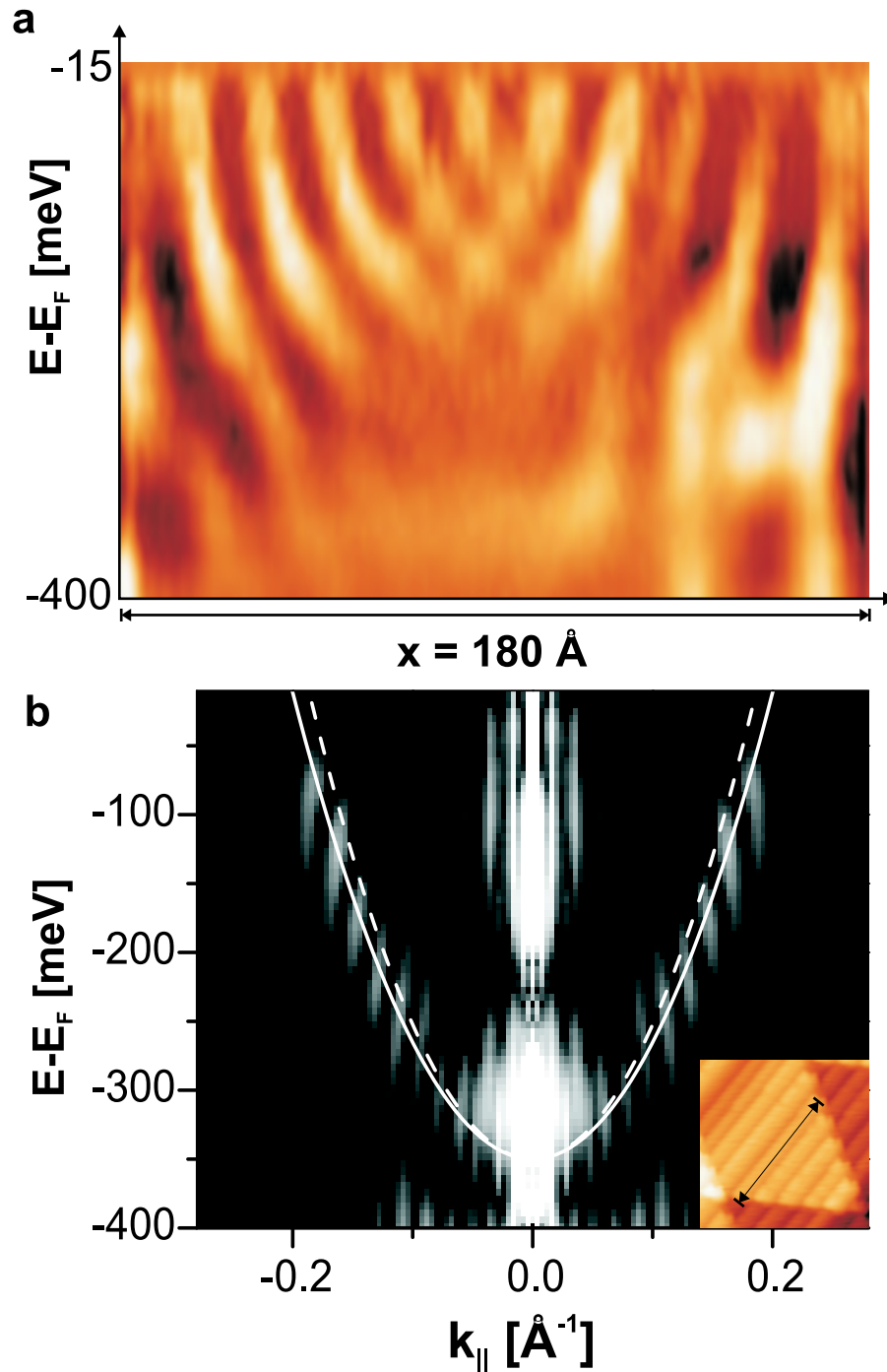


Abbildung 5.10: Dispersionsmessung auf einer 24 \AA breiten Terrasse (siehe Kasten in (b)). (a) Räumliche Entwicklung des dI/dV -Signals mit der Energie. Da die 180 \AA lange Stufe an beiden Seiten in einer Versetzung endet, gibt es eine Interferenz der stehenden Wellen von beiden Enden. (b) 1D-FT von (a). Die durchgezogene Linie ist ein parabolischer Fit an die Intensitätsmaxima mit der effektiven Masse von $m^* = 0,45 m_e$. Die gestrichelte Linie entspricht einer Projektion für den Fall, dass sich Elektronen auf der gemittelten Oberfläche bewegen können (siehe Text). Vertikale Streifen in der Mitte des Bildes sind ein Artefakt der Fourier-Transformation.

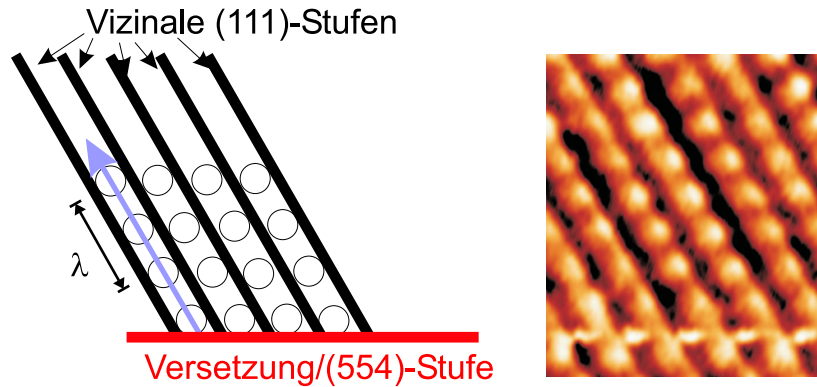
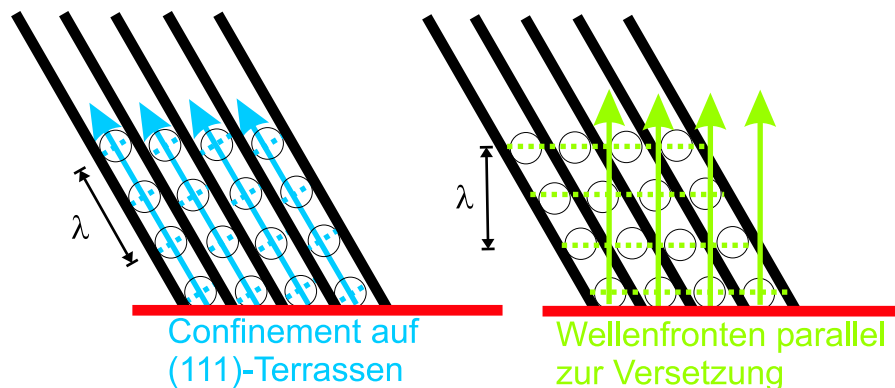
(a) Messung**(b) Modell der Streugeometrie**

Abbildung 5.11: Streugeometrie auf einer vizinalen Oberfläche. (a) Aufgrund der vizinalen Stufenüberstruktur können die Wellenmuster nur entlang der (111)-Terrassen vermessen werden. Rechts ein gedrehter Ausschnitt aus Abbildung 5.9 (b). (b) Zwei mögliche Streugeometrien. Im linken Fall können sich Elektronen nur entlang der (111)-Terrassen bewegen. Die Elektronenwellenlänge stimmt mit der Messung überein. Rechts ist eine Situation dargestellt, in der sich Elektronen frei auf der mittleren Oberfläche bewegen können. Die Wellenfronten sollten in diesem Fall parallel zu der Versetzung liegen. Gemessen wird eine Projektion der Wellenlänge entlang der (111)-Terrasse.

Wenn man also die effektive Masse auf Cu(111) misst und mit dem Ergebnis auf Cu(554) vergleicht, kann man die richtige Streugeometrie bestimmen. Um konsistent in unserer Messmethode zu bleiben, wurde deshalb die effektive Masse auf einer außergewöhnlich breiten (111)-Terrasse (über 200 Å) der Cu(554)-Oberfläche mittels STS-Messung bestimmt (siehe Abbildung 5.12). Das Ergebnis von $m^* = 0,45 m_e$ stimmt gut mit hochauflösenden ARPES-Untersuchungen auf Cu(111) überein, bei denen eine effektive Masse von $0,41 m_e$ gemessen wurde [Rei01]. Außerdem kann man die energetische Verschiebung des Bandminimums von Cu(554) gegenüber Cu(111) erkennen.

Die sehr gute Übereinstimmung der effektiven Massen aus den FT-STM-Analysen bei

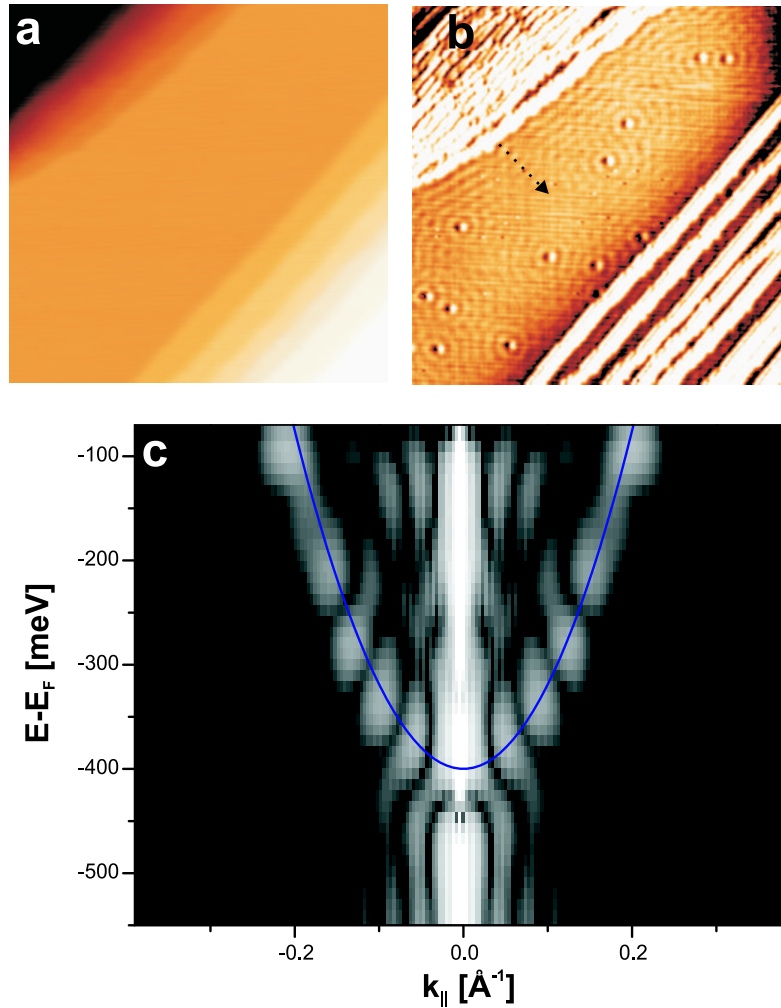


Abbildung 5.12: (a) Topografie einer außergewöhnlich breiten (111)-Terrasse auf Cu(554). $I = 1,5$ nA, $V_b = -60$ mV; $500 \times 500 \text{ \AA}^2$. (b) Simultan aufgenommenes dI/dV -Bild (Regelkreis geschlossen). Der Pfeil zeigt die Richtung an, in der die Dispersion gemessen wurde. (c) Ergebnis der 1D-FT der STS-Messung. Der parabolische Fit ergibt $m^* = 0,45 m_e$.

Cu(554) und Cu(111) lässt darauf schließen, dass die experimentell erzwungene Messrichtung die korrekte Streugeometrie widerspiegelt. Physikalisch bedeutet das, dass die Elektronen wirklich auf die (111)-Terrassen beschränkt sind und sich nicht frei auf der mittleren (554)-Oberfläche bewegen können. Dieser Befund ist konsistent mit den Ergebnissen aus Abschnitt 5.2.2, bei denen sich gezeigt hat, dass das Confinement sehr stark ist.

Die Wellenmuster in den dI/dV -Bildern lassen sich auf die Beschränkung der Elektronen im Potential der vizinalen Stufen zurückführen. Dies wird besonders deutlich, wenn man Gebiete mit unterschiedlichen Terrassenbreiten untersucht. In Abbildung 5.13 ist ein solcher Fall gezeigt, in dem die Wellenmuster auf einer 40 \AA breiten Terrasse („A“) zusammen mit denen von „normalen“ vizinalen Terrassen der Cu(554)-Oberfläche abgebildet werden. Die Oszillationen im dI/dV -Signal treten auf A wesentlich früher auf als

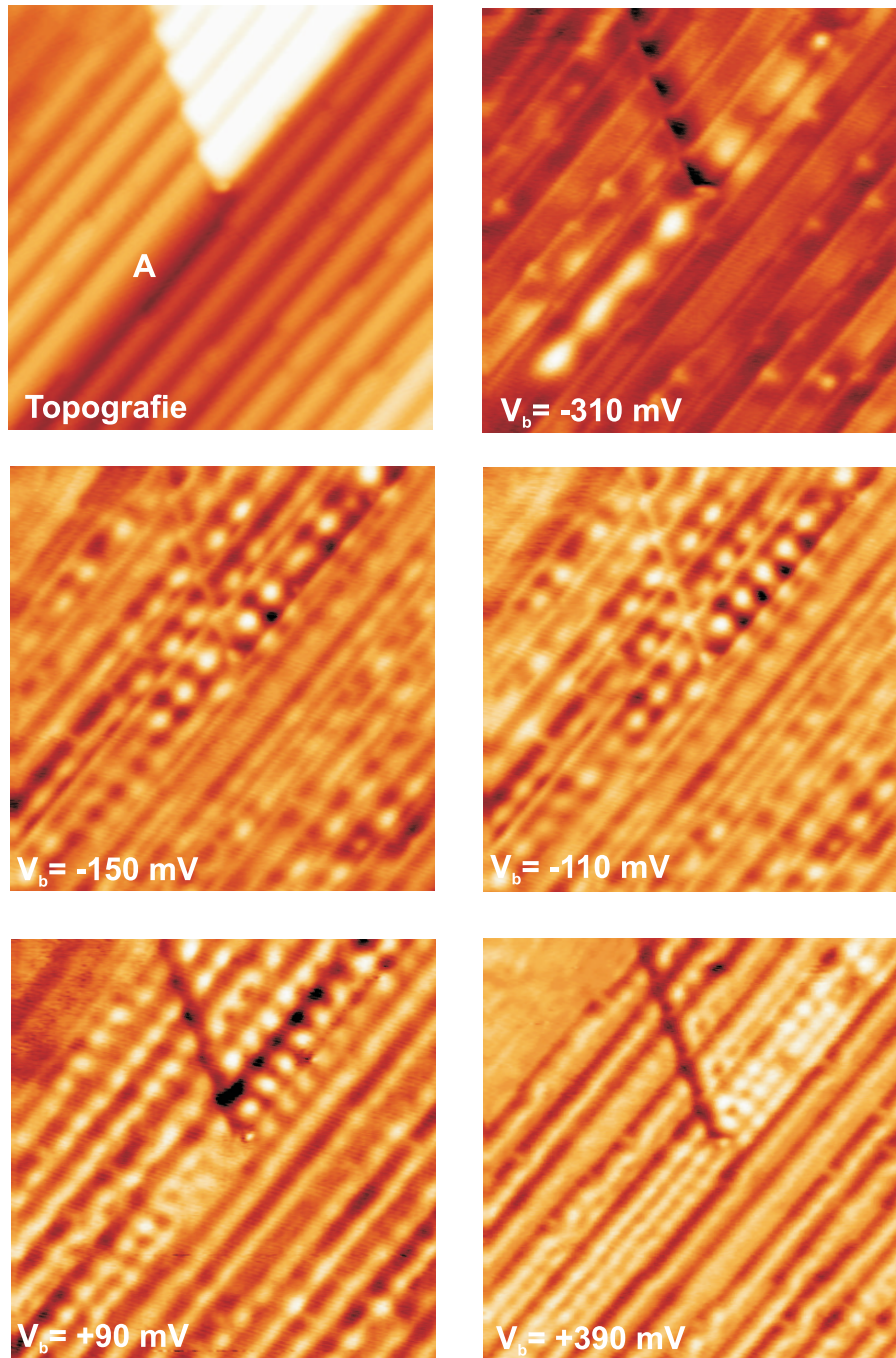


Abbildung 5.13: Topografie (oberste Reihe links) bei $V_b = -370$ mV und dI/dV -Bilder auf Cu(554). Besonders zu beachten ist die 40 \AA breite Terrasse A. Die Tunnelspannung der dI/dV -Bilder ist jeweils links unten markiert. $I = 6$ nA; $250 \times 250 \text{ \AA}^2$.

auf den durchschnittlich etwa 22 \AA breiten Terrassen: bei $V_b = -310$ mV erkennt man nur auf A eine Wellenstruktur, genauso wie das Maximum in den dI/dV -Spektren bei breiten Terrassen früher auftritt (Abschnitt 5.2). Auf den anderen Terrassen setzt das ausgeprägte Muster erst wesentlich später ein ($V_b = -150$ mV) und zeigt die Dispersion zu kleineren Wellenlängen mit zunehmender Energie ($V_b = -110$ mV). Bei noch höheren

Energien bilden sich auf Terrasse A höhere Quantenzustände aus mit zwei Maxima senkrecht zu den Stufen ($V_b = +90$ mV) und sogar drei Maxima ($V_b = +390$ mV), während auf den schmalen Terrassen ein solches Verhalten nicht zu beobachten ist. Dabei ist zu beachten, dass im einfachen Quantentopfmodell die Lage der Zustände quadratisch von der inversen Terrassenbreite L abhängt (Gleichung 5.6). Bei etwa doppelter Breite L auf Terrasse A im Vergleich zu den schmalen Terrassen tritt bei diesen das zweite Maximum also erst bei der vierfachen Energie relativ zum Einsatz des Oberflächenzustands auf. Dies ist ein weiterer Beleg dafür, dass das Terrassen-Confinement die elektronische Struktur dominiert.

Es sei erwähnt, dass sich aus der Position und Form der dI/dV -Maxima senkrecht zu den Stufen wichtige Eigenschaften des Potentialtopfes ableiten lassen. So konnten die unterschiedlichen Streupotentiale von auf- und absteigenden Stufen im Rahmen eines Fabry-Pérot-Resonator-Modells nachgewiesen werden [Bür98]. Auf Cu(554) sind die durchschnittlichen Terrassen allerdings zu schmal und die höheren Quantenzustände nicht zugänglich, sodass eine quantitative Analyse nicht sinnvoll durchzuführen ist.

5.4 Schmalere Terrassen: Cu(332)

In der Einleitung dieses Kapitels wurden bereits die Photoemissionsmessungen von Ortega et al. kurz erwähnt [Ort00]. Sie zeigen, dass die elektronischen Eigenschaften von vizinalen Cu(111) vom Grad der Fehlorientierung ϕ abhängen. Für kleine Fehlorientierungen wird das Minimum des Oberflächenzustands zwar zu höheren Energien verschoben, liegt aber im reziproken Raum nach wie vor um den $\bar{\Gamma}$ -Punkt, also in $[111]$ -Richtung. Für höhere Fehlorientierungen bewegt sich das Bandminimum graduell von der Terrassennormalen (das heißt $[111]$) zur Normalen der mittleren Oberfläche, also der Orientierung der Vizinalfläche. Dies wurde dahingehend interpretiert, dass die Oberflächenelektronen für kleine ϕ sich nur auf den (111)-Terrassen bewegen können, während sich die Wellenfunktion für große ϕ über die Stufen hinweg fortsetzt und parallel zur mittleren Oberfläche verläuft (siehe Abbildung 5.14). Im ersten Fall spricht man von Terrassenmodulation, im zweiten Fall von Stufenmodulation. Durch Untersuchungen an Vizinalflächen mit verschiedenen Fehlorientierungen wurde der kritische Winkel, der diese beiden Regime trennt, zu $\phi_{\text{krit}} \approx 7^\circ$ bestimmt [Ort01].

Der Übergang zur Stufenmodulation mit zunehmender Fehlorientierung wurde mittels \mathbf{k} -Raum-Argumenten erklärt. Dazu betrachtet man die Energiefläche im \mathbf{k} -Raum bei ca. -400 meV (also der Einsatzenergie des (111)-Oberflächenzustands), die sich besonders am Hals um den L -Punkt nicht sehr von der Fermifläche unterscheidet (siehe Abbildung 5.14). In $[111]$ -Richtung, also entlang $\bar{\Gamma}L$, existiert eine Bandlücke der projizierten Volumenzustände, in der der Shockley-artige Oberflächenzustand von Cu(111) liegt. Mit zunehmender Fehlorientierung wird die Projektion der Bandlücke auf die vizinale Oberfläche immer kleiner, bis sie sich letztlich ganz schließt. Der Winkel, bei dem dies für Cu(111) passiert, beträgt in etwa 7° . Oberhalb dieses Winkels kann es also kei-

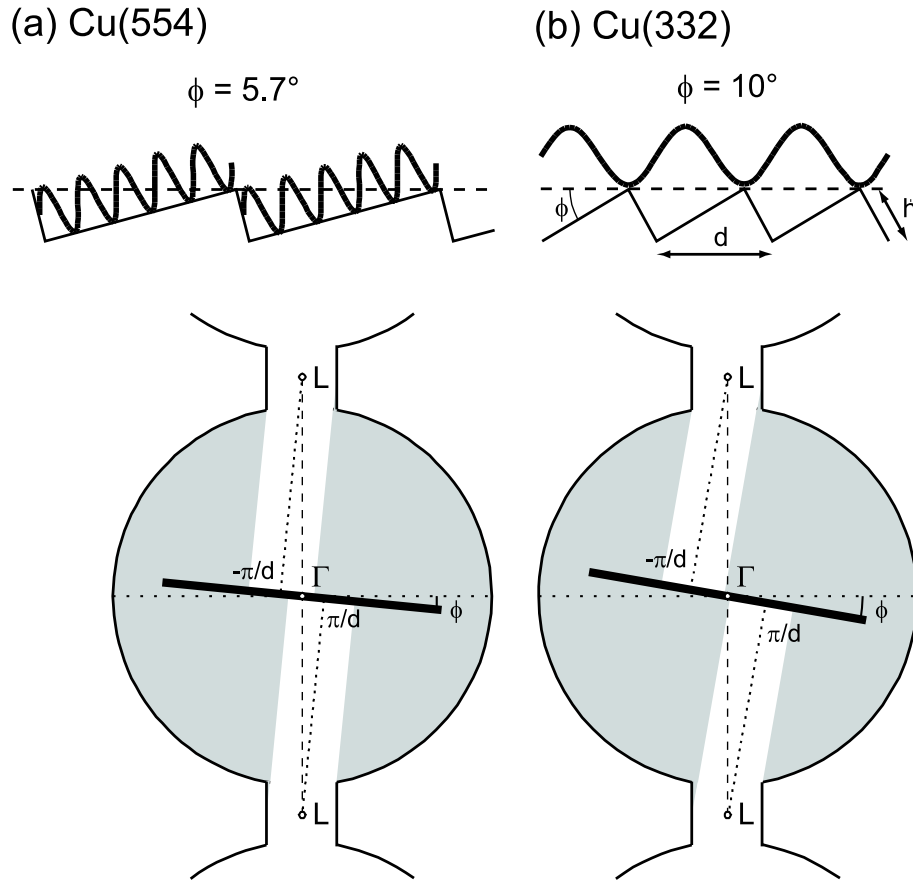


Abbildung 5.14: Modell für zwei unterschiedliche elektronische Regime von vizinalen Oberflächen (nach [Ort00, Ort01]). Oben die Position der Wellenfunktion relativ zur vizinalen Stufenstruktur, unten die Projektion der Volumenzustände auf die vizinale Oberfläche. Die Linie $\overline{\Gamma L}$ entspricht der $[111]$ -Richtung. (a) Für kleine Fehlorientierungen wie Cu(554) mit $\phi = 5, 7^\circ$ spricht man von Terrassenmodulation. Elektronen propagieren auf den (111) -Terrassen. Die Projektion der Bandlücke der Volumenzustände auf die Vizinalenebene ist immer noch offen. (b) Für große Fehlorientierungen wie Cu(332) mit $\phi = 10^\circ$ herrscht Stufenmodulation, das heißt Elektronen können sich auf der mittleren Oberfläche bewegen. Die projizierte Bandlücke schließt sich, und OberflächenElektronen können an Volumenzustände koppeln.

nen reinen Oberflächenzustand mehr geben. Ortega et al. beschreiben diesen Vorgang als einen Übergang von einem Oberflächenzustand in eine Oberflächenresonanz, bei der OberflächenElektronen an Volumenzustände koppeln. Die Autoren argumentieren weiter, dass dadurch der Photoemissionssignal-Beitrag der Fourier-Komponente der (rein terrassenmodulierten) (111) -Elektronen um $\overline{\Gamma}$ kleiner wird als der der Fourierkomponente des periodischen Übergitters um π/d [Ort01]. Anders ausgedrückt verschiebt sich der Schwerpunkt der Wellenfunktion stärker in das Volumen, wodurch die Terrassenorientierung nicht mehr so wichtig ist und das Stufenpotential effektiv verringert wird. Dadurch wird eine Kopplung zwischen einzelnen Terrassen ermöglicht. Dies gilt selbst dann, wenn — wie im Fall von Au(111) — die Stufen auf breiten Terrassen für totales Confinement sorgen [Ort02].

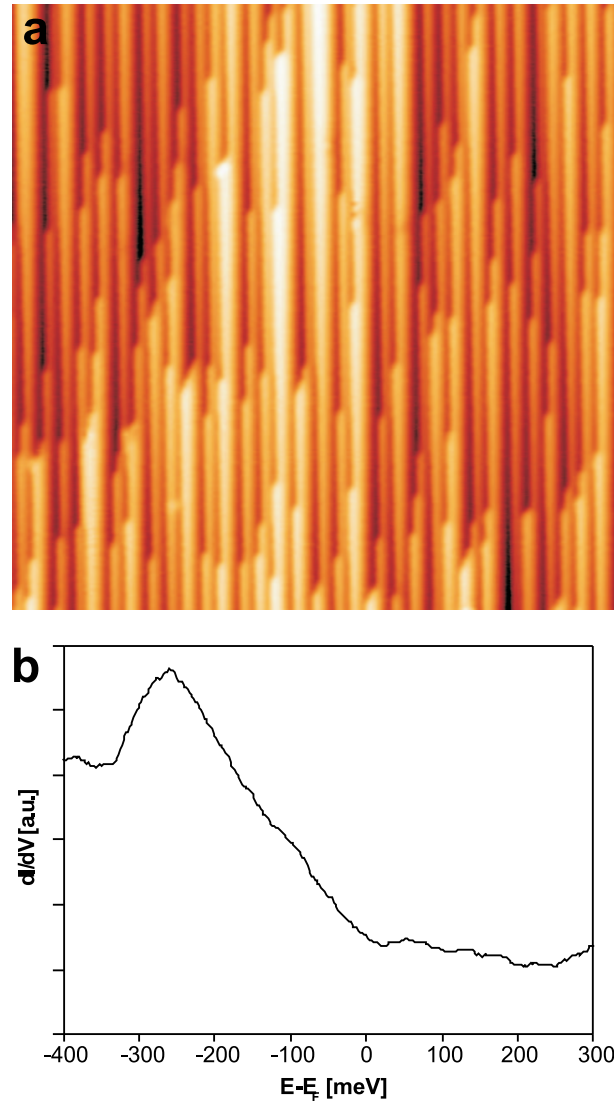


Abbildung 5.15: Cu(332). (a) STM-Topografie der Probe. $I = 1 \text{ nA}$, $V_b = -200 \text{ mV}$; $260 \times 260 \text{ \AA}^2$. (b) dI/dV -Spektrum auf einer 12 \AA breiten Terrasse ($f_{\text{mod}} = 600 \text{ Hz}$). Der Einsatz des Oberflächenzustands liegt bei etwa -300 meV .

Die in dieser Arbeit untersuchte Cu(554)-Oberfläche liegt mit einer Fehlorientierung von $5,7^\circ$ also noch im Bereich der Terrassenmodulation. Die in den letzten beiden Abschnitten besprochenen Ergebnisse weisen in der Tat auf ein starkes Terrassenconfinement hin. Allerdings muss erwähnt werden, dass die von Ortega et al. verwendeten Oberflächen A-Stufen aufwiesen, während bei Cu(554) B-Stufen vorliegen. Da aber STM-Untersuchungen an Ag(111) zeigen, dass die Streupotentiale für beide Stufentypen identisch sind [Bür98], kann man davon ausgehen, dass die Ergebnisse vergleichbar sind.

Um zu prüfen, ob sich der Übergang zur Stufenmodulation auch im STM bemerkbar macht, wurden vergleichende Messungen an Cu(332), einer Vizinalfläche mit $\phi = 10^\circ$ und $L = 12 \text{ \AA}$, vorgenommen. Die Stufen verlaufen wie bei Cu(554) entlang der $[11\bar{2}]$ -

Richtung, sind also $\{111\}$ -artig. Der Cu(332)-Kristall¹ wurde analog zu Abschnitt 5.1 präpariert.

Die Untersuchungen fanden größtenteils nicht mit dem in Kapitel 3 beschriebenen STM statt, sondern wurden zusammen mit K.-F. Braun in der Arbeitsgruppe Rieder der Freien Universität Berlin durchgeführt. Das dabei verwendete Tieftemperatur-STM wurde von ihm während seiner Doktorarbeit aufgebaut und erlaubt vergleichbare Messbedingungen [Bra01].

In Abbildung 5.15 (a) sieht man eine topografische Aufnahme von Cu(332). Kinkenatome sind wesentlich auffälliger als auf Cu(554) (siehe Abbildung 5.3), da die Terrassen nur $5\frac{1}{3}$ Atomreihen breit sind und jede Kinke somit die Terrasse um 20 % schmaler macht. Insgesamt ist die Stufenstruktur ähnlich regelmäßig wie bei Cu(554).

In den dI/dV -Spektren (Abbildung 5.15 (b)) lässt sich erkennen, dass für diese Oberfläche mit einer durchschnittlichen Terrassenbreite von 12 Å der Einsatz des Oberflächenzustands auf -300 meV nach oben verschoben ist, also um 150 meV (Cu(554): 50 meV) relativ zur flachen Cu(111)-Oberfläche (vergleiche Abbildung 3.4). Die Energieverschiebung von 150 meV liegt über dem Wert von 110 meV, der aus Photoemissionsmessungen gewonnen wurde [Sha88]; die Absolutwerte liegen jedoch relativ dicht zusammen (-300 meV zu -280 meV). Gegenüber den Spektren auf Cu(554) ist vor allem auffällig, dass sich auch für positive Tunnelspannungen kein Maximum in den Kurven abzeichnet. Dies wird auch durch dI/dV -Maps bestätigt, in denen keine stehenden Wellenmuster zu erkennen sind, auch nicht für hohe positive Spannungen. Allerdings ist es nicht gelungen, wie auf Cu(554) Versetzungen durch Spitzenkontakt zu erzeugen. Es ist aber zu erwarten, dass auch Punktdefekte oder Kinkenatome als Streuer ausreichen sollten, um die Friedel-artigen Oszillationen sichtbar zu machen.

Ähnlich wie in den Untersuchungen von Ortega et al. mittels Photoemission zeigt sich also auch in den STM/STS-Messungen, dass sich die elektronischen Eigenschaften der vizinalen Cu(111)-Oberflächen in zwei unterschiedliche Regime aufteilen lassen. Die Ergebnisse auf Cu(332) werden im nächsten Abschnitt zusammen mit den Resultaten für Cu(554) diskutiert.

5.5 Diskussion der elektronischen Struktur

Die Untersuchungen an Cu(554) zeigen, dass die elektronische Struktur des Cu(111)-Oberflächenzustands durch das Stufenübergitter modifiziert wird. Bei Energien am und knapp über dem Einsatz des Zustands weist die Oberfläche einen zweidimensionalen Charakter auf, da die Verschiebung des Einsatzes für alle Terrassen gleich ist. Sobald aber die Elektronen auf einer Terrasse die Randbedingungen für einen Quantentopfzustand erfüllen (das heißt die Terrassenbreite entspricht der halben Wellenlänge), werden sie lokal beschränkt. Modellrechnungen zeigen, dass die Reflektivität eines 1D Quantentopfs selbst für die gestreuten (also die nicht gebundenen) Zustände stark erhöht ist, wenn die

¹MaTeck GmbH, Jülich

Resonanzbedingung 5.6 erfüllt ist [Sti93]. Die Kopplung zwischen den Terrassen wird somit reduziert. Die Ergebnisse aus Abschnitt 5.3, welche die Beschränkung der Elektronenwellen auf die Terrassen belegen, bestätigen, dass die elektronische Struktur von diesem vornehmlich eindimensionalen Verhalten dominiert wird. Für eine perfekt periodische Stufenüberstruktur erwartet man einen starken Anstieg in der LDOS an der Grenze der Übergitter-Brillouinzone, die mit der Bedingung für die Quantentopffresonanz übereinstimmt [Dav91]. Es bedarf genauerer theoretischer Untersuchungen, um unterscheiden zu können, ob es sich bei der Terrassenbreitenabhängigkeit des Maximums um einen Effekt der Abweichung von der Periodizität handelt oder um ein rein lokales Phänomen, das völlig unabhängig von dem Stufenübergitter ist.

Ein kontinuierlicher Übergang von zwei- in eindimensionale Zustände wurde für das bereits in Kapitel 2 erwähnte Au/Si(111)-(5×2)-System gefunden, bei dem die Goldatome Ketten auf dem Siliziumsubstrat bilden [Los00]. Die Ergebnisse von Ortega et al. (siehe Abschnitt 5.4) zeigen, dass sich ein Wechsel von Terrassen- zu Stufenmodulation mithilfe der Fehlorientierung bewerkstelligen lässt. Dieser Übergang wurde durch das Verschwinden der projizierten Bandlücke im \mathbf{k} -Raum erklärt. In dem in diesem Kapitel verwendeten Quantentopf-Modell lässt sich der Übergang auch anders verstehen. Für den kritischen Winkel von $\phi_{\text{krit}} = 7^\circ$ liegt das Bandminimum in der Photoemission bei -290 meV [Ort01]. Dieser Wert wird in STS-Messungen niedriger sein, reicht hier aber in erster Näherung aus, da auch der kritische Winkel letztlich eine Interpolation aus den Messungen an nur drei vizinalen Cu(111)-Oberflächen ist. Bei einer mittleren Terrassenbreite von $L = 17 \text{ \AA}$ liegt dann der erste Quantentopfzustand gerade bei der Fermienergie:

$$E_0 + \Delta E + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^* L^2} = E_F \quad . \quad (5.11)$$

Das bedeutet, dass für größere Fehlorientierungen kein besetzter Quantentopfzustand mehr vorhanden ist. In Abwesenheit des lokalen Confinements wird der schwächere, Kronig-Penney-artige Effekt die elektronische Struktur bestimmen. Dies könnte erklären, warum in der Photoemission, die nur besetzte Zustände abbilden kann, kein Beitrag von terrassengebundenen Elektronen für $\phi > \phi_{\text{krit}}$ gefunden werden konnte.

Es bleibt die Frage zu klären, wie sich die Ergebnisse auf Cu(332) in diesem Ortsraum-Modell verstehen lassen. Für STS-Messungen ist die Unterscheidung von besetzten und unbesetzten Zuständen nicht relevant, da die Energien sowohl über als auch unter dem Fermienergielevel zugänglich sind. Im Bild des unendlich hohen Potentialtopfs sollte der erste Quantentopfzustand bei etwa $+280$ meV auftreten. Zwei mögliche Mechanismen könnten dafür verantwortlich sein, warum sich kein lokales Confinement bei Cu(332) nachweisen lässt. Erstens liegt bei dieser Terrassenbreite der Quantenzustand energetisch sehr viel höher über dem Bandminimum. Dadurch ist die effektive Barrierenhöhe und damit die Reflektivität der Stufen reduziert und könnte zum Beispiel für die Ausbildung von stehenden Elektronenwellen nicht ausreichen. Zweitens wird für beschränkte Systeme die Entvölkerung des Oberflächenzustands vorhergesagt, wenn die Dimension L des Confinements kleiner ist als die halbe Fermiwellenlänge λ_F [Mem95]. Dieser Befund ist

auf schmalen Terrassen einer Ag(111)-Oberfläche bestätigt worden [Mor02]. Im Fall von Cu(111) beträgt $\lambda_F/2 = 14 \text{ \AA}$, ist also größer als die mittlere Terrassenbreite von 12 \AA auf Cu(332). Dies könnte erklären, warum kein Maximum in den Kurven für positive Energien ($E > E_F$) gefunden wurde.

Insgesamt zeigt sich, dass die Geometrie der Oberfläche (das heißt die Terrassenbreite) einen großen Einfluss auf die elektronische Struktur hat, indem sie die Position der Quantentopfzustände relativ zu E_F verschiebt. Eine solche Wechselwirkung zwischen Oberflächenmorphologie einerseits und Quantentopfenergien andererseits ist für eine Vielzahl von Systemen bekannt und führt zu so interessanten Effekten wie „magischen“ Schichtdicken in metallischen Filmen [Zha98, Pag99, Ote02, Su01].

Die STS-Untersuchungen an vizinalen Cu(111)-Oberflächen zeigen, dass das lokale Confinement auf den Terrassen eine wichtige Rolle spielt. Das einfache Quantentopfmodell bietet einen alternativen Erklärungsansatz dafür, warum auf vizinalen Oberflächen ein Übergang von Terrassen- zu Stufenmodulation mit abnehmender Terrassenbreite beobachtet werden kann.