

Kapitel 8

Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Doktorarbeit wurden Untersuchungen an verschiedenen niederdimensionalen Strukturen an Oberflächen vorgestellt. Es zeigt sich, dass das Rastertunnelmikroskop in besonderer Weise für solche Untersuchungen geeignet ist, da es ein hohes örtliches Auflösungsvermögen mit spektroskopischen Messmethoden verbindet. Die Analyse mittels Fouriertransformation von stehenden Elektronenwellen, die im STM abgebildet werden können, erlaubt darüber hinaus Aussagen über die Dispersion und Dynamik von Elektronen.

Barium bildet bei niedrigen Bedeckungen auf einer Si(111)-Oberfläche ein kettenförmiges Adsorbatsystem. Die Struktur-Informationen, die mit STM und LEED gewonnen wurden, waren zunächst widersprüchlich, da im STM eine lokale (3×2) -Struktur bestimmt wurde, während LEED ein (3×1) -Beugungsbild zeigte. Darüber hinaus ergaben spektroskopische Messungen, dass die Oberfläche halbleitend ist, was sich nicht durch eine (3×1) -Struktur erklären lässt. In dem von Lee et al. [Lee01] vorgeschlagenen Strukturmodell belegen die Bariumatome (ein divalentes Erdalkalimetall) im Vergleich zur bekannten Alkalimetall-induzierten (3×1) -Rekonstruktion bei nur halber Bedeckung jeden zweiten Adsorptionsplatz und weisen somit eine (3×2) -Periodizität auf. Die Ähnlichkeit zur Alkalimetall-induzierten (3×1) -Rekonstruktion ergibt sich aus der gleichen Anzahl von *Elektronen* pro Einheitszelle. Dieses Modell konnte den halbleitenden Charakter erklären, nicht aber die Ursache für das (3×1) -Beugungsmuster.

Die Auswertung der STM-Bilder ergab, dass die Bariumketten nur entlang der Ketten Fernordnung aufweisen. Da Barium auf dem HCC-rekonstruierten Siliziumsubstrat jeden zweiten möglichen Adsorptionsplatz belegt, gibt es zwei mögliche Kettenkonfigurationen, die um eine halbe Einheitszelle gegeneinander versetzt sind. Die STM-Ergebnisse zeigten, dass Phasenfluktuationen der Konfiguration zwischen benachbarten Ketten sehr häufig auftreten, wodurch die $\times 2$ -Periodizität nur lokal über eine geringe Anzahl von Einheitszellen auftritt. Dies führt zu einem pseudo- (3×1) -LEED-Bild, wie Simulationen beweisen konnten. Die Häufigkeit und Zufälligkeit der Phasenfluktuationen wird als Beleg der Unabhängigkeit der Bariumketten voneinander — und damit des eindimensionalen Charakters — interpretiert.

Messungen an vizinalen Cu(111)-Oberflächen zeigen, wie in einem solchen System

die elektronische Struktur sowohl vom Stufen-Übergitter als auch von lokalen Effekten abhängt. Mit dem STM ließen sich Abweichungen von der Stufen-Periodizität bestimmen, sodass diese Effekte getrennt werden konnten. Der Einsatz des (111)-Oberflächenzustands ist auf vizinalen Oberflächen zur Fermienergie verschoben. Da die Verschiebung auf allen Terrassen gleich ist, muss es sich um einen Effekt des *periodischen* Potentials der Stufen handeln, der in einem Kronig-Penney-Modell beschrieben wird.

In den dI/dV -Spektren auf den vizinalen Terrassen von Cu(554) gibt es im Gegensatz zu einer flachen Probe ein Maximum, dessen Energie von der Terrassenbreite abhängt. Dieses Maximum ließ sich als Confinement im Potentialtopf der einzelnen Terrasse erklären. Dispersionsmessungen an den Terrassen bestätigten, dass das lokale Confinement die elektronische Struktur dominiert. Dieser Befund könnte einen neuen Erklärungsansatz dafür bieten, warum in Photoemissionsmessungen ein Übergang von Terrassen- zu Stufenmodulation mit zunehmender Fehlorientierung gefunden wurde [Ort00]. Der kritische Winkel, der den Übergang beschreibt, entspricht gerade der Terrassenbreite, bei der der erste Quantentopfzustand bei der Fermienergie liegt. Das bedeutet, dass für größere Fehlorientierungen kein Beitrag des lokalen Confinements in der Photoemission erwartet werden kann. Vergleichsmessungen auf Cu(332), einer Oberfläche mit größerer Fehlorientierung als Cu(554), zeigten auch keine Anzeichen lokalen Confinements im STM jenseits des kritischen Winkels. Es könnte sein, dass das Potential der Stufen in diesem Fall zu schwach ist, um für lokales Confinement zu sorgen. Insgesamt zeigten die Untersuchungen an vizinalen Oberflächen, wie stark Dimensionalität und elektronische Struktur vom Grad der Fehlorientierung bzw. der Terrassenbreite abhängen.

Neue Zustände an Oberflächen

Breibt man ein STM im Feldemissionsregime, so bilden sich gebundene Zustände im Tunnelkontakt. Die Untersuchungen in dieser Arbeit belegten, dass die Feldemissionsresonanzen Aussagen über die elektronischen Eigenschaften einer Oberfläche oberhalb des Vakuumniveaus zulassen. Mithilfe eines einfachen Modells [Caa99] ließ sich der Übergang von einer Bandlücke zu projizierten Volumenzuständen nachweisen, der sich in einer starken Verringerung der Reflektivität der Oberfläche bemerkbar macht.

Ein rein eindimensionales Bild reicht aber nicht aus, um die Feldzustände vollständig zu charakterisieren. dI/dV -Maps konnten zeigen, dass die Elektronen der Feldzustände lateral ausgedehnt sind und mit Defekten der Oberfläche wechselwirken. Dies ist erstaunlich, da die Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Feldzustands-Elektronen einige Ångström weit von der Probe entfernt maximal ist. Die Wellenmuster, die in solchen Bildern an Defekten zu erkennen sind, weisen eine veränderliche Wellenlänge auf, die vom Abstand zum Defekt abhängt. Die Positionsabhängigkeit ließ sich qualitativ verstehen, indem man annimmt, dass das lateral abfallende elektrische Potential zu einer Zunahme an kinetischer Energie führt.

Für Experimente mit Feldzuständen sind eine Reihe möglicher Einsatzgebiete denkbar. Sie erlauben nicht nur die Untersuchung der elektronischen Struktur mit dem STM

über das Vakummniveau hinaus, sondern könnten zur Identifikation verschiedener z.B. chemischer Spezies an einer Oberfläche dienen. Da ihre Existenz letztlich ein Interferenzphänomen zwischen der Tunnelbarriere auf der einen Seite und der Probenoberfläche auf der anderen Seite ist, hängen sie stark von den (lokalen) Reflexionseigenschaften der Probe ab, die etwa die Unterscheidung verschiedener Punktdefekttypen möglich macht.

Von Oberflächen- zu Volumenzuständen

Messungen an Cu(100) und Ag(110) zeigten, dass mit dem Rastertunnelmikroskop auch die elektronische Struktur der auf die Oberfläche projizierten Volumenzustände untersucht werden kann. In Energiebereichen, in denen keine Oberflächenzustände existieren, konnten auf diesen Oberflächen Oszillationen mittels dI/dV -Messungen sichtbar gemacht werden. Dies weist darauf hin, dass das Kontinuum der Volumenzustände nicht gleichförmig zum Tunnelsignal beitragen kann. Durch einen Vergleich mit der berechneten Bandstruktur stellte sich heraus, dass genau der Verlauf der Bandkante, die den Übergang von den Volumenzuständen zu Bandlücken markiert, abgebildet wird. Dieses Verhalten kann im Fall von Ag(110) nicht durch einen k -abhängigen Transmissionsfaktor erklärt werden, wie in einer früheren Arbeit vorgeschlagen wurde [Pet98a]. Eine mögliche Erklärung könnte sich aus der Berechnung der Zustandsdichte der projizierten Volumenzustände an der Oberfläche ergeben. Es bleibt abzuwarten, ob die Bandkanten an der Oberfläche ein lokales Maximum der Zustandsdichte im Kontinuum der Volumenzustände darstellen.

Ausblick

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass das Rastertunnelmikroskop in dieser Arbeit als universelles Instrument benutzt wurde, um unterschiedliche niederdimensionale Systeme an Oberflächen zu untersuchen. Das STM verbindet in idealer Weise eine hohe Ortsauflösung mit einer Reihe von spektroskopischen Mess- und Analysemethoden, um die elektronische Struktur zu vermessen.

Bei den untersuchten Systemen handelte es sich zum einen um solche, deren Dimensionalität intrinsisch vorgegeben war, wie bei dem Barium-Adsorbatsystem auf Si(111) oder den Feldzuständen, die (durch die Messmethode bedingt) im Tunnelkontakt auftreten. Andererseits wurden solche Strukturen behandelt, bei denen Confinement in Form von vizinalen Oberflächen oder der Projektion von Volumenelektronen auf die Oberfläche auftrat. Diese letztere Vorgehensweise, die die Modifikation einer gut definierten Systems wie etwa des Cu(111)-Oberflächenzustands beinhaltet, lässt sich als „Top Down“-Ansatz zur Reduzierung der Dimensionalität von Elektronen verstehen.

In Zukunft wird sich das Studium niederdimensionaler Systeme möglicherweise stärker auf den entgegengesetzten „Bottom Up“-Ansatz konzentrieren, bei dem die Strukturen gezielt aus einer kleinen Anzahl Atome aufgebaut sind, die allmählich komplexere Strukturen bilden. Ein Beispiel für einen solchen Ansatz wurden in Kapitel 2.3.2 mit den Untersuchungen von Ketten aus Goldatomen gegeben, die auf einem elektronisch entkop-

pelten Substrat gezielt durch STM-Manipulation geformt wurden [Nil02, Wal02]. Aktuelle STM-Ergebnisse an Goldclustern aus $\sim 10^4$ Atomen auf einem Graphit-Substrat zeigen, dass in einem solchen System zwar starke Confinement-Effekte in allen drei Dimensionen auftreten, die Cluster aber andererseits schon volumenartige Eigenschaften (wie z.B. das Auftreten von Bandlücken und Oberflächenzuständen) aufweisen [Bar03].

Beide Ansätze erlauben es gleichermaßen, das Zusammenspiel von räumlicher Ausdehnung einerseits und elektronischer Struktur andererseits zu bestimmen. Zukünftig mag es sogar möglich sein, die beiden Herangehensweisen zu kombinieren, und so den Grenzbereich von atomarer zu oberflächen- bzw. volumenartiger elektronischer Struktur besser zu verstehen.