

Hendrik Hölscher

Darstellung der Forschungsaktivitäten

Seit der Erfindung der Rasterkraftmikroskopie durch Binnig, Quate und Gerber vor 15 Jahren [G. Binnig *et al.*, Phys. Rev. Lett. **56**, 930 (1986)] hat sich diese Methode als ein Standardwerkzeug in der Oberflächenphysik durchgesetzt. Dies wurde vor allem durch das weite Einsatzgebiet bei gleichzeitiger hoher Auflösung bewirkt. Trotz dieser großen Verbreitung und der vielen wissenschaftlichen Erfolge der Rasterkraftmikroskopie bei der Untersuchung von Oberflächen gelang es erst 1995 mit dem sogenannten „*Nicht-Kontakt*“-Modus des Rasterkraftmikroskops (engl. *non-contact atomic force microscope*, NC-AFM) [F.-J. Giessibl, Science **267**, 68 (1995)] eine „echte“ atomare Auflösung – d.h. eine Abbildung von Punktdefekten – zu erreichen [Y. Sugawara *et al.*, Science **270**, 1646 (1995)].

Dieser Modus unterscheidet sich wesentlich von dem historisch älteren „*Kontakt-Modus*“, bei dem sich Spitze und Probe in direktem mechanischem Kontakt befinden. Die dadurch hervorgerufene Deformation von Spitze und Probe verhindert in der Regel die Auflösung von einzelnen Punktdefekten wie z.B. die Abbildung von einzelnen Fehlstellen. Um den direkten Kontakt und die damit verbundenen Deformationen von Spitze und Probe möglichst gering zu halten, wird in der Nicht-Kontakt-Rasterkraftmikroskopie der Federbalken mit der integrierten Spitze im Vakuum zu Resonanzschwingungen angeregt (s. Abb. 1a). Nähert sich die Spitze während der Oszillationen der Probenoberfläche an, so ändert sich aufgrund der Kraft-Wechselwirkung F_{ts} zwischen Spitze und Probe die Resonanzfrequenz des Federbalkens. Die Meßgröße dieser Methode ist die Differenz zwischen der Eigenfrequenz des Federbalkens f_0 und der aktuellen Resonanzfrequenz f , die Frequenzverschiebung $\Delta f = f - f_0$.

Der Grund für die Verschiebung der Resonanzfrequenz f wird verständlich, wenn man sich die Bewegung der Mikroskopspitze in ihrem Gesamtpotential anschaut, das in Abb. 1 schematisch dargestellt ist. Ist der Federbalken weit von der Probe entfernt, so bewegt sich die Spitze aufgrund der Federkraft des Federbalkens in einem parabolischen Potential (gepunktete Linie). Daher ist die Oszillation des Federbalkens sinusförmig, und die Resonanzfrequenz wird durch die Eigenfrequenz f_0 des Federbalkens bestimmt und ist unabhängig von der Resonanzamplitude. Wird nun der Federbalken-Proben-Abstand verringert, so wird das Potential, in dem sich die Spitze bewegt, verändert. Aufgrund der Wechselwirkung zwischen Probe und Spitze bewegt sich die Spitze nun in einem effektiven Potential $U(z)$ (durchgezogene Linie), das sich aus der Summe des parabolischen Potentials und dem Wechselwirkungspotential $V_{int}(z)$ (gestrichelte Linie) zusammensetzt. Dadurch wird die sinusförmige Oszillation leicht gestört, und der Federbalken schwingt nun mit einer neuen Frequenz f , die von der Amplitude A und vom Federbalken-Proben-Abstand d abhängt.

Eine charakteristische Eigenschaft dieses Verfahrens ist, daß die atomare Auflösung von Probenoberfläche typischerweise mit Resonanzamplituden erreicht wird (ca. 100-200 Å), die wesentlich größer sind als der Bereich der kurzreichweitigen Spitzen/Proben-Kräfte, die die

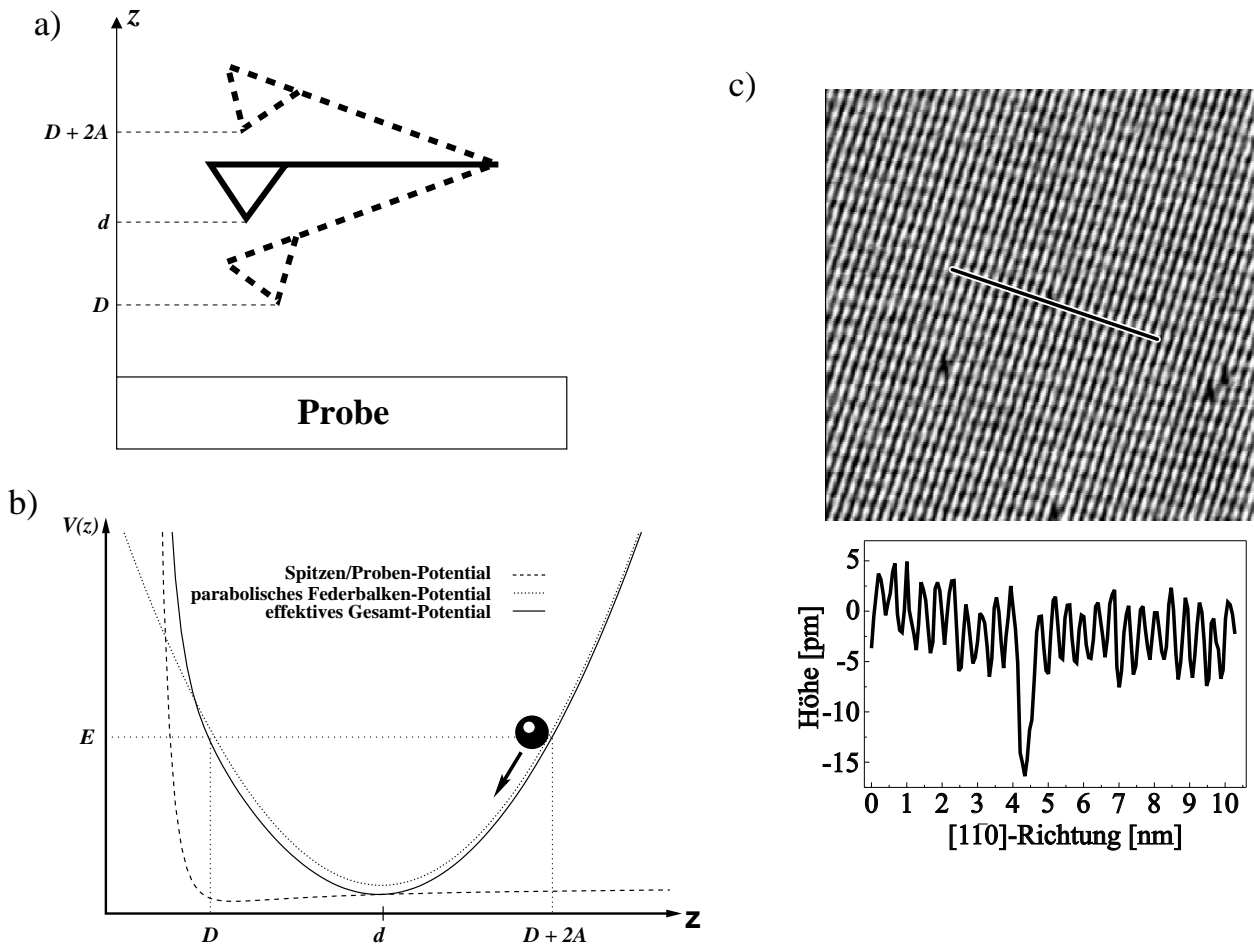


Abbildung 1: **a)** Eine schematische Darstellung des Prinzips der Nicht-Kontakt-Rasterkraftmikroskopie (nicht maßstabsgetreu). Der Federbalken oszilliert mit der Amplitude A und nähert sich der Probenoberfläche bis auf den Abstand D . **b)** Illustration der Frequenzverschiebung in der dynamischen Rasterkraftmikroskopie (s. Text). **c)** Ein Nicht-Kontakt-Rasterkraftmikroskopie-Bild der Oberfläche von InAs(110). Deutlich sind einzelne Fehlstellen zu erkennen, die als fehlende As-Atome identifiziert werden können.

atomare Auflösung bewirken (ca. 5-10 Å). Weiterhin sind die detektierten Frequenzverschiebungen von einigen Hertz im Vergleich zu den Resonanzfrequenzen der verwendeten Federbalken (ca. 100-200 kHz) ebenfalls sehr klein. Abbildung 1c) zeigt anhand des Beispiels einer InAs(110)-Oberfläche [A. Schwarz *et al.*, Phys. Rev. B **61**, 2837 (2000)], daß mit dieser Methode trotzdem einzelne Fehlstellen abgebildet werden können und demonstriert so das gute Auflösungsvermögen eines NC-AFM. Eine ähnlich gute Auflösung ist auch auf vielen anderen Oberflächen wie z.B. Halbleitern, Ionenkristallen und van-der-Waals Oberflächen erreicht worden.

Aufgrund dieser experimentellen Erfolge der Nicht-Kontakt Rasterkraftmikroskopie gab und gibt es parallel dazu auch theoretische Arbeiten, die sich einerseits mit der Berechnung der Frequenzverschiebung Δf sowie der Modellierung der Spitzen-Proben-Wechselwirkung F_{int} beschäftigt haben. Neben dieser Strategie, für bestimmte Spitzen und Proben die Frequenzverschiebung zu berechnen, um diese Ergebnisse dann mit dem Experiment zu vergleichen, gibt es auch die Möglichkeit, die Frequenzverschiebung als Funktion der Amplitude

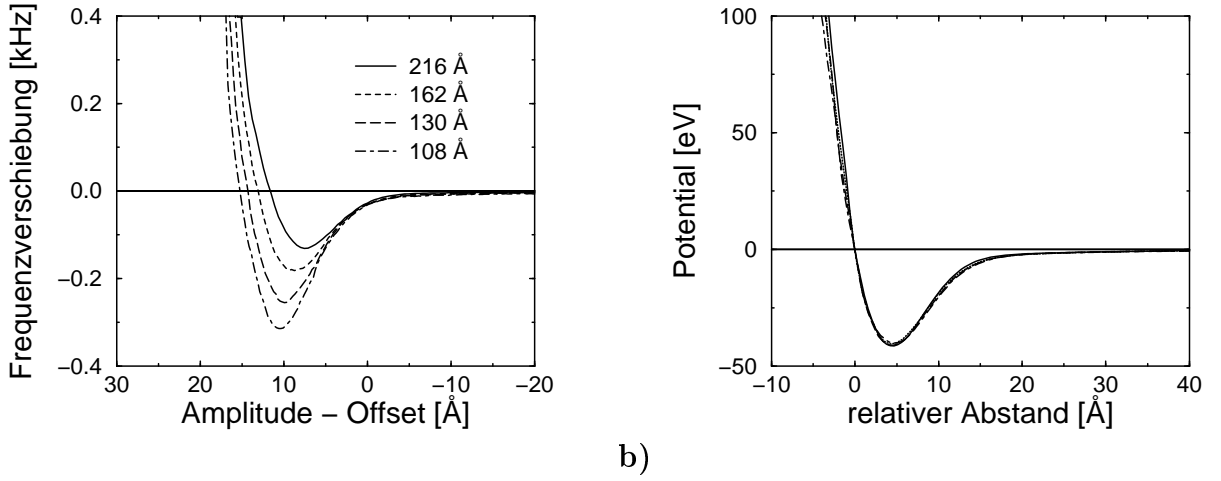


Abbildung 2: Die Rekonstruktion der Spitzen/Proben-Wechselwirkung aus experimentellen Messungen der Frequenzverschiebung als Funktion der Amplitude. **a)** Vier gemessene $\Delta f(A)$ -Kurven, die im UHV mit einer Siliziumspitze und einer Graphitprobe für verschiedene Abstände aufgenommen wurden. **b)** Das aus den in a) dargestellten Kurven berechnete Spitzen/Proben-Potential.

oder des Federbalken-Proben-Abstands zu messen und daraus die Spitzen-Proben-Kraft direkt zu bestimmen. Dieser Weg eröffnet die faszinierende Möglichkeit, Kräfte direkt auf atomarer Skala zu messen [Hölscher *et al.*, Phys. Rev. B **61**, 12678 (2000)].

Hier stellen wir kurz die von uns entwickelte Methode vor, wie das Spitzen/Proben-Potential direkt aus der Messung der Frequenzverschiebung als Funktion der Resonanzamplitude berechnet werden kann. Die Grundidee basiert auf der Invertierung des bereits aus den Grundvorlesungen bekannten Integrals

$$T(E) = \sqrt{2m} \int_D^{D+2A} \frac{dz}{\sqrt{E - U(z)}} \quad (1)$$

dabei ist T die Periodendauer, m die effektive Masse des Federbalkens und $U(z)$ das effektive Potential in dem sich die Spitze bewegt. Die Extrahierung des effektiven Potentials $U(z)$ ist im allgemeinen Fall aufgrund der Zweideutigkeit der invertierten Funktion $z(U)$ nicht möglich. Im speziellen Fall der Rasterkraftmikroskopie kann man allerdings annehmen, daß die Spitzen/Proben-Wechselwirkung für größere Abstände nahezu Null ist. Daher ist $U(z)$ für größere Abstände identisch mit dem parabolischen Federpotential und Gl. (1) kann nun doch invertiert werden. Nach einigen Umformungen erhält man [Hölscher *et al.*, Phys. Rev. Lett. **83**, 4780 (1999)]

$$D(A) = - \int_0^{A_0} \frac{f_0 - \Delta f(A'_0)}{f_0 + \Delta f(A'_0)} \frac{A'_0}{\sqrt{A_0^2 - A'^2_0}} dA'_0, \quad (2)$$

dabei ist A_0 die Amplitude des ungestörten (parabolischen) Potentials. Anhand dieser Formel kann sehr einfach die Funktion $D(A_0)$ bestimmt und schließlich das Spitzen/Proben-Wechselwirkungspotential aus

$$V_{\text{int}}(D) = \frac{1}{2} c (A_0(D)^2 - D^2). \quad (3)$$

berechnet werden. Die Konstante c ist die Federkonstante des Federbalkens.

Eine Anwendung dieser Methode auf experimentelle Daten ist in Abb. 2 dargestellt. Es wurde ein Silizium-Federbalken mit einer Federkonstanten von 38 N/m und einer Eigenfrequenz von 177 kHz verwendet. Die vermessene Probe war eine Graphit (0001)-Oberfläche. Die Messungen wurden im UHV bei einem Druck von 10^{-9} mbar für verschiedene Federbalken-Proben-Abstände durchgeführt. Alle Kurven haben die gleiche Form, unterscheiden sich allerdings qualitativ aufgrund der verschiedenen Abstände (s. Abb. 2a). Wie zu erwarten, ist das daraus berechnete Spitzen/Proben-Potential allerdings für alle Abstände identisch (s. Abb. 2b). Dies demonstriert die hohe Auflösung und Stabilität dieser Methode.

Zusammenarbeit mit anderen Mitgliedern des Graduiertenkollegs

Theorie: Dr. Th. Dröse, Dr. C. T. Rieck

Experiment: Dr. M. Kleiber, Dipl.-Phys. A. Wachowiak, Dipl.-Phys. J. Wiebe

Ausblick

Um einen besseren Einblick in die Spitzen/Proben-Wechselwirkung zu erhalten, ist geplant, in der Zukunft *ab initio* Molekulardynamik-Simulationen durchzuführen. So ist es möglich, die gemessenen Spitzen/Proben-Wechselwirkungen direkt mit Simulationen auf atomarer Skala zu vergleichen.

Publikationen

Angehörige und Gäste des Graduiertenkollegs sind unterstrichen

- [1] U. D. Schwarz und H. Hölscher: *Reibung auf der Nanometerskala – Nanotribologie mit dem Rasterkraftmikroskop*, Phys. Bl. **54**, 1127 (1998).
- [2] H. Hölscher, W. Raberg, U. D. Schwarz, A. Hasbach, K. Wandelt und R. Wiesendanger: *Imaging of sub-cell structures in the contact mode of the scanning force microscope*, Phys. Rev. B **59**, 1661 (1999).
- [3] H. Hölscher, U. D. Schwarz und R. Wiesendanger: *Calculation of the frequency shift in dynamic force microscopy*, Appl. Surf. Sci. **140**, 344 (1999).
- [4] H. Hölscher, W. Allers, U. D. Schwarz, A. Schwarz und R. Wiesendanger: *Determination of tip-sample interaction potentials by dynamic force spectroscopy*, Phys. Rev. Lett. **83**, 4780 (1999).
- [5] H. Hölscher, A. Schwarz, W. Allers, U. D. Schwarz und R. Wiesendanger: *Quantitative analysis of dynamic force spectroscopy data on graphite(0001) in the contact and non-contact regime*, Phys. Rev. B **61**, 12678 (2000).

Teilnahme an Tagungen

- “Nanotribology with the Scanning Force Microscope “
H. Hölscher, U. D. Schwarz, O. Zwörner und R. Wiesendanger
196. Heraeus-Seminar: “Mathematical Modelling and Analysis of Nonsmooth Dynamical Systems”
in Bad Honnef, Mai 1998
Beitragsform: Poster
- “Analysis of the Frequency Shift in Noncontact Atomic Force Microscopy“
H. Hölscher, A. Schwarz, U. D. Schwarz, W. Allers und R. Wiesendanger
1st International Workshop on Noncontact Atomic Force Microscopy (NC-AFM 1998)
in Osaka (Japan), Juli 1998
Beitragsform: Vortrag
- “Towards the Understanding of Dynamic Force Microscopy: Analysis of the Anharmonic Cantilever Oscillations“
H. Hölscher, A. Schwarz, U. D. Schwarz, W. Allers und R. Wiesendanger
5th International Conference on Nanometer-scale Science and Technology (NANO V)
in Birmingham (Großbritannien), September 1998
Beitragsform: Vortrag
- “Towards the understanding of dynamic scanning force microscopy: Analysis of the contrast mechanism“
H. Hölscher, W. Allers, U. D. Schwarz, A. Schwarz und R. Wiesendanger
3rd Conference on Development and Technological Application of Scanning Probe Methods (SXM3)
in Basel (Schweiz), September 1998
Beitragsform: Vortrag
- “Rekonstruktion des Spitzen-Proben-Potentials aus der Frequenzverschiebung im dynamischen Modus des Rasterkraftmikroskops“
H. Hölscher, A. Schwarz, U. D. Schwarz, W. Allers und R. Wiesendanger
Frühjahrstagung der DPG
in Münster, März 1999
Beitragsform: Vortrag
- “Analysis of the Frequency Shift in Dynamic Force Microscopy“
H. Hölscher, W. Allers, U. D. Schwarz, A. Schwarz und R. Wiesendanger
10th International Conference on Scanning Tunneling Microscopy/Spectroscopy and Related Proximal Probe Microscopy (STM'99)
in Seoul (Korea), Juli 1999
Beitragsform: Vortrag

Forschungsaufenthalte und eingeladene Vorträge

- „Reibung auf der Nanometerskala – Nanotribologie mit dem Rasterkraftmikroskop“
Eingeladener Vortrag vor der Arbeitsgruppe Angewandte Mathematik des Mathematischen Instituts der Universität Köln

Einladung durch: Prof. Dr. T. Küpper
in Köln, Januar 1999

Tagungsbeiträge als Mitautor

- “Analyse des Abbildungsprozesses in der Kontaktkraftmikroskopie auf atomarer Skala“
U. D. Schwarz, H. Hölscher, W. Raberg, A. Hasbach, R. Wiesendanger
und K. Wandelt
Frühjahrstagung der DPG
in Regensburg, März 1998
Beitragsform: Poster
- “Analyse des Kontrastmechanismus in der dynamischen Rasterkraftmikroskopie“
U. D. Schwarz, H. Hölscher und R. Wiesendanger
Frühjahrstagung der DPG
in Münster, März 1999
Beitragsform: Poster

Eigene Vorträge im Rahmen des Graduiertenkollegs

- „Rasterkraftmikroskopie“
2. Workshop des Graduiertenkollegs
„Physik nanostrukturierter Festkörper“
in St. Peter-Ording, Januar 1998