

Aufbau eines Rastertunnelmikroskops
für Landau Level - Spektroskopie
auf topologischen Isolator - Oberflächen



Dissertation

zur Erlangung des naturwissenschaftlichen Doktorgrades
der Julius-Maximilians-Universität Würzburg

vorgelegt von
Oliver Storz
aus Ravensburg

Würzburg 2016

Eingereicht am 18.04.2016
bei der Fakultät für Physik und Astronomie

1. Gutachter: Prof. Dr. Matthias Bode
2. Gutachter: Prof. Dr. Friedrich Reinert

der Dissertation

Vorsitzender: Prof. Dr. Ansgar Denner

1. Prüfer: Prof. Dr. Matthias Bode
2. Prüfer: Prof. Dr. Friedrich Reinert
3. Prüfer: Prof. Dr. Björn Trauzettel

im Promotionskolloquium

Tag des Promotionskolloquiums: 14.09.2016

Zusammenfassung

Im Rahmen dieser Arbeit wurde ein Rastertunnelmikroskop (STM) für Messungen bei tiefen Temperaturen und hohen Magnetfeldern konzipiert und aufgebaut. Die Probertemperatur kann dabei auf bis zu 1.4 Kelvin reduziert werden, was spektroskopische Messungen mit extrem hoher Energieauflösung ermöglicht. Die thermische Verbreiterung spektroskopischer Merkmale liegt somit im Bereich eines Milli-Elektronenvolts, wie durch den Fit der Bandlücke eines supraleitenden Materials demonstriert wird. Ein linearer Bewegungsmechanismus ermöglicht die Positionierung des STM-Körpers innerhalb einer supraleitenden Spule, in der Magnetfelder von bis zu 12.5 Tesla senkrecht zur Probenoberfläche erzeugt werden können. Das System erlaubt des Weiteren den Wechsel von Spitzen und Proben innerhalb des Kryostaten sowie das Aufdampfen von Einzelatomen auf die kalte Probenoberfläche ohne die Probe aus dem STM zu entfernen. Um den Einfluss mechanischer Vibrationen zu minimieren wurde ein innovatives Feder-Dämpfungssystem entwickelt, das eine Stabilität des Tunnelkontakts von bis zu einem Pikometer gewährleistet.

Der zweite Teil dieser Arbeit präsentiert die Ergebnisse von STM-Messungen auf Antimon-Tellurid (Sb_2Te_3). Sb_2Te_3 gehört zur relativ neu entdeckten Materialklasse der Topologischen Isolatoren (TI). Diese Verbindungen besitzen auf ihren Oberflächen Zustände mit linearer Dispersion, die durch die Zeitumkehr-Invarianz geschützt werden. Fokus unserer Messungen ist dabei der Einfluss eines magnetischen Feldes auf die Eigenschaften eines derartigen unkonventionellen 2D-Elektronengases. Dazu wurde die Entstehung von Landau Level (LL) innerhalb eines Magnetfelds genau untersucht. Die zwei in dieser Arbeit untersuchten Hauptaspekte sind:

- (i) Die energetische Verbreiterung, die Rückschlüsse auf die Lebensdauer zulässt
- (ii) Die örtliche Fluktuation.

Erstaunlicherweise kann die gemessene Verbreiterung der Landau Resonanzen nicht mit gängigen Mechanismen der Lebenszeit-Verbreiterung erklärt werden. Aus diesem Grund wird eine alternative Interpretation basierend auf der Heisenbergschen Unschärferelation vorgestellt, die im guten Einklang mit den von uns gewonnenen Daten steht. Des Weiteren zeigen örtlich aufgelöste Messungen systematische Abweichungen in der Dirac-Geschwindigkeit positiver und negativer Landau Re-

sonanzen. Diese Fluktuationen stehen dabei in direktem Zusammenhang mit Änderungen im lokalen chemischen Potential. Da die physikalischen Ursachen dieser Abweichung im Rahmen dieser Arbeit nicht zweifelsfrei geklärt werden konnten, werden im letzten Teil die zugrundeliegenden Messergebnisse vorgestellt und mögliche Erklärungen des Verhaltens präsentiert.

Abstract

The scope of this thesis is the design and construction of a scanning tunneling microscope (STM) operating at low temperatures and high magnetic fields. The sample temperature can be reduced to 1.4 Kelvin which permits to perform spectroscopic measurements with extremely high energy resolution. As demonstrated by fitting the gap of a superconducting material the thermal broadening of spectroscopic features is routinely found to be of the order of one milli-electronvolt. A linear travel mechanism allows to position the STM head inside a superconducting solenoid where magnetic fields up to 12.5 Tesla can be applied perpendicular to the sample surface. Tips and samples can be exchanged in-situ and single atoms can be directly evaporated onto the cold sample surface without extracting the sample from the STM. To minimize the impact of mechanical vibrations, an innovative spring-damping system has been developed giving the tunneling junction a stability as low as one pico-meter.

The second part of this thesis presents the results of STM measurements on antimony telluride (Sb_2Te_3). Sb_2Te_3 belongs to the relatively new class of materials known as topological insulators (TI). These compounds host on their surfaces linearly dispersing states which are protected by time-reversal symmetry. The focus of our measurements is the influence of a magnetic field on the properties of this unconventional 2D electron gas. The evolution of Landau levels (LL) in magnetic fields has been carefully analysed. Two are the main aspects which have been tackled:

- (i) Their energetic broadening, which can be directly linked to the lifetime
- (ii) Their spacial fluctuation.

Surprisingly, the energetic broadening of the Landau peaks cannot be explained by any of the mechanisms commonly limiting the lifetime. An alternative interpretation based on Heisenberg's uncertainty principle is presented, which is found to be in good agreement with our data. Furthermore spatially resolved experiments reveal systematic deviations of the Dirac velocities for positive and negative LL. These fluctuations are intimately linked to variations of the local chemical potential. As the physical origin of this deviation could not be unambiguously identified, the last part presents the experimental data and suggests possible explanations of this finding.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Theoretische Grundlagen des Rastertunnelmikroskops	3
2.1	Theorie und Funktionsweise eines Rastertunnelmikroskops	3
2.1.1	Theorie des quantenmechanischen Tunnelstroms	4
2.2	Messmethoden in der Rastertunnelmikroskopie	10
2.2.1	Topographische Messung	10
2.2.2	Spektroskopische Messung	12
2.2.3	Zustandsdichtekarten und Quasi-Teilchen-Interferenz	14
3	Design und Aufbau des 1K-STM	17
3.1	Kryostat	17
3.1.1	1K-Pot	18
3.1.2	Supraleitender Magnet	19
3.2	Mechanische Ankopplung des STM	20
3.3	Thermische Ankopplung des STM	21
3.4	Schwingungsdämpfung	22
3.5	STM-Körper	26
3.5.1	Material	26
3.5.2	Aufbau	28
3.6	Präparations-System	33
4	Charakterisierung anhand verschiedener Probensysteme	35
4.1	Mechanische Stabilität (BiAg_2)	35
4.2	Elektronisches Auflösungsvermögen und Messungen im Magnetfeld (NbSe_2)	38
5	Theoretische Grundlagen für Landau-Level Spektroskopie auf topologischen Isolatoren	41
5.1	Elektronen im magnetischen Feld - Teil I	41
5.2	Der Topologische Isolator	43
5.2.1	Der Quanten-Hall-Effekt	43
5.2.2	Topologische Äquivalenzklassen	45
5.2.3	Der Quanten-Spin-Hall-Effekt und die \mathbb{Z}_2 -Invariante	47

Inhaltsverzeichnis

5.2.4	Der 2D-Topologische Isolator	53
5.2.5	Der 3D-Topologische Isolator	54
5.3	Elektronen im magnetischen Feld - Teil II	56
6	STM-Messungen auf Antimon-Tellurid Sb_2Te_3	59
6.1	Landau-Level-Spektroskopie auf Sb_2Te_3	59
6.1.1	Datenverarbeitung zur Bestimmung der Eigenschaften von Landau-Level	62
6.1.2	Analyse der energetischen Verbreiterung einzelner LL	64
6.1.3	Analyse der räumlichen Variation einzelner LL	73
7	Zusammenfassung und Ausblick	79
	Literatur	81
	Liste eigener Publikationen	91
	Danksagung	93

1 Einleitung

1965 stellte Gordon Moore ein Gesetz auf, nachdem sich die Leistungsfähigkeit von Mikroprozessoren alle 12 Monate verdoppelt. Abgesehen von der Zeitspanne, die aktuell mit 18 Monaten angegeben wird, behielt er damit weitgehend recht [1]. Der Anstieg der Leistung wird dabei heute durch zunehmende Verdichtung der Transistoren innerhalb eines Chips realisiert. So ist die Größe eines Transistors heutzutage nicht viel größer als 14 nm [2]. Nun scheint jedoch das Ende des Zeitalters des Moorschen Gesetzes eingeläutet, da sich eine zusätzliche Verkleinerung der Transistoren aus zweierlei Gründen als schwierig erweist:

So stehen einer weiteren Verkleinerung einerseits quantenmechanische Effekte entgegen, nachdem der Fluss von Elektronen nicht mehr kontrolliert werden kann. Andererseits kann die durch den endlichen Widerstand der verwendeten Materialien entstehende Wärme nicht mehr effizient abgeleitet werden [3]. Eine Lösung für das zweite Problem deutete sich 1980 mit der Entdeckung des Quanten-Hall-Effekts durch von Klitzing an, da sich Ströme hier nur auf definierten Bahnen bewegen können und damit Streuung, eine der Hauptursachen von elektrischem Widerstand und Wärmeentwicklung, massiv reduziert werden kann [4, 5]. Einer technischen Anwendung stehen jedoch weiterhin die extremen Bedingungen zur Realisierung dieses Phasenzustands hinsichtlich Magnetfeld und Temperatur entgegen. Jüngste Forschungen zeigen hingegen einen weiteren vielversprechenden Kandidaten, das Quanten-Spin-Hall-System (QSH), auch bekannt als Topologischer Isolator (TI). Diese Materialklasse zeigt dabei an ihren Oberflächen einen ähnlichen elektrischen Widerstand wie ein QHE-System, es sind jedoch Realisierungen bei Umgebungsbedingungen denkbar [6, 7].

Darüber hinaus bilden die speziellen physikalischen Eigenschaften von QSH-Systemen neue Möglichkeiten der Realisierung exotischer Phasenzustände. So wird beispielsweise vermutet, dass das Zusammenspiel zwischen topologischen Oberflächenzuständen und Supraleitern den Nachweis von Majorana-Ferminonen ermöglicht [8] oder elektrische Ladungen in der Nähe eines TI magnetische Monopole auf dessen Oberfläche induzieren [9].

Kern dieser Arbeit ist die Erforschung der physikalischen Eigenschaften dieser vergleichsweise neuen Materialklasse sowie der Aufbau eines dafür notwendigen Messinstruments. Dazu werden zunächst in Kapitel 2 die Grundlagen der von uns verwendeten Messmethode, der Rastertunnelmikroskopie, vorgestellt. Dabei wird

1 Einleitung

sowohl auf die theoretischen Hintergründe wie auch auf unterschiedliche in dieser Arbeit verwendete Messmethoden eingegangen.

Im folgenden Kapitel 3 wird der Aufbau des von uns entworfenen Instruments diskutiert. Dabei wird zunächst auf die Funktionsweise der Komponenten zur Erzeugung tiefer Temperaturen und hoher magnetischer Felder eingegangen. Im Folgenden wird die mechanische und thermische Ankopplung des Rastertunnelmikroskops (STM) sowie dessen Aufbau vorgestellt.

In Kapitel 4 wird die Leistungsfähigkeit des von uns entwickelten STM demonstriert. Dazu wird die mechanische Auflösungsvermögen auf BiAg_2 und das energetische Auflösungsvermögen auf NbSe_2 untersucht. Darüber hinaus wird zusätzlich die Stärke des Magnetfelds auf der Probenoberfläche nachgewiesen.

Nachdem die Grundlagen der Messmethode und das Messinstrument vorgestellt wurden, werden in Kapitel 5 die physikalischen Eigenschaften Topologischer Isolatoren diskutiert. Dabei wird sowohl auf die theoretischen Hintergründe, wie auch experimentellen Ergebnisse eingegangen. Zusätzlich wird das Verhalten von Elektronen in magnetischen Feldern auf TI-Oberflächen und konventionellen Materialien vorgestellt und Unterschiede herausgearbeitet.

Kapitel 6 behandelt schließlich eigene Messungen auf dem Topologischen Isolator Sb_2Te_3 . Speziell wird hierbei der Einfluss hoher magnetischer Felder auf die Zustandsdichte von Sb_2Te_3 und die damit verbundene Erzeugung von Landau Level (LL) untersucht. Dabei wird ein alternativer Ansatz für die Interpretation der energetischen Verbreiterung einzelner LL vorgestellt. Des Weiteren wird der Einfluss lokaler Potentialvariationen auf LL diskutiert und mögliche Ursachen vorgeschlagen.

Abschließend werden in Kapitel 7 die Ergebnisse dieser Arbeit zusammengefasst und mögliche weitergehende Untersuchungen vorgeschlagen.

2 Theoretische Grundlagen des Rastertunnelmikroskops

2.1 Theorie und Funktionsweise eines Rastertunnelmikroskops

Rastertunnelmikroskopie (engl. scanning tunneling microscopy, STM) beschreibt eine experimentelle Methode zur Bestimmung topografischer und spektroskopischer Eigenschaften eines elektrisch leitfähigen Materials im Subnanometerbereich. Seit seiner Entwicklung durch die grundlegende Arbeit von G. Binnig, H. Rohrer, C. G. Gerber und E. Weibel in den frühen 1980er Jahren [10, 11], die 1986 mit dem Nobelpreis der Physik ausgezeichnet wurde, stellt sie nach wie vor eine der Messmethoden mit größtem räumlichem Auflösungsvermögen innerhalb der Oberflächenphysik dar. Das Arbeitsprinzip des STM beruht auf dem quantenmechanischen Tunneleffekt, genauer der Wahrscheinlichkeit, mit der ein Elektron von einer Seite einer Vakuumbarriere auf die andere tunnelt. Die folgenden Kapitel sollen eine kurze Übersicht über die grundlegenden Effekte geben, die topografische, spektroskopische und magnetische Messungen eines Material ermöglichen. Des Weiteren werden kurz die Geräte und Techniken erklärt, die zur Messung und Auswertung der Effekte notwendig sind.

Der schematische Aufbau eines Rastertunnelmikroskops ist in Abbildung 2.1(a) dargestellt. Das Kernstück eines Rastertunnelmikroskops bildet der Röhrenscanner. Ein Röhrenscanner besteht aus einem piezoelektrischen Material, an dessen Außenseite vier getrennte Elektroden aufgedampft sind und dessen Innenseite aus einer Elektrode besteht. Wird nun eine Potentialdifferenz zwischen diesen Elektroden angelegt, so verformt sich der Röhrenscanner mechanisch aufgrund des piezoelektrischen Effekts. Diese Verformung ist weitgehend linear zur Potentialdifferenz und erlaubt aufgrund der Anordnung der Elektroden eine sub-Pikometer genaue Positionierung der Spitze in allen drei Raumrichtungen (vgl. Abb. 2.1(b)). Die angeschlossene Messelektronik steuert dabei die einzelnen Spannungen der Elektroden und rechnet diese automatisch in die erwartete Position der Spitze um.

Die eigentliche Messgröße in STM-Messungen ist der Tunnelstrom zwischen Spitze und Probe. Dazu wird eine Potentialdifferenz U_B zwischen Spitze und Probe angelegt (im Folgenden BIAS oder BIAS-Spannung genannt) und der resultieren-

2 Theoretische Grundlagen des Rastertunnelmikroskops

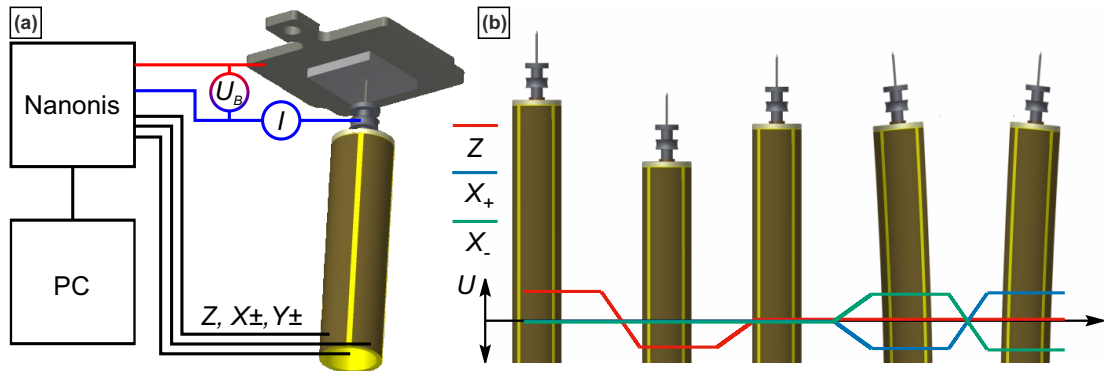


Abbildung 2.1: Schematische Darstellung der Funktion eines Rastertunnelmikroskops. (a) Übersicht des prinzipiellen Aufbaus sowie der elektrischen Kontaktierung. (b) Darstellung der Reaktion des Röhrenscanners auf das Anlegen elektrischer Spannungen an unterschiedliche Kontakte.

de Strom I zwischen Spitze und Probe über die Messelektronik erfasst. Damit erhöht sich die Anzahl der unabhängigen Variablen auf den Tunnelstrom auf 4: $I(x, y, z, U_B)$. Da eine Messung der Eigenschaften einer Probe abhängig von allen Variablen im Regelfall zeitlich nicht machbar ist, wird innerhalb von STM-Messungen üblicherweise auf Methoden zurückgegriffen, bei denen mindestens 2 dieser Variablen konstant gehalten werden (inklusive I). Bevor jedoch auf die gängigsten Messmethoden eingegangen wird, soll erst einmal die Theorie des Tunnelstroms näher erläutert werden.

2.1.1 Theorie des quantenmechanischen Tunnelstroms

Qualitativ sind für das Zustandekommen eines quantenmechanischen Tunnelstroms zwei Voraussetzungen essentiell. Die erste Voraussetzung bildet ein hinreichender Überlapp der Wellenfunktionen zwischen Zuständen der Spitze Ψ_S und der Probe Ψ_P . Im Gegensatz zur klassischen Vorstellung, in der ein Elektron ein punktförmiges Teilchen am Ort \vec{r} darstellt, wird ein Elektron in der Quantenmechanik durch eine ortsabhängige Wellenfunktion $\langle \vec{r} \rangle = \int \Psi^*(\vec{r}') \vec{r} \Psi(\vec{r}') d\vec{r}'$ beschrieben [13]. Dadurch ergeben sich für die Eigenschaften des Elektrons im Vergleich zum klassischen Bild zwei wichtige Unterschiede. Erstens kann der genaue Ort des Elektrons nicht bestimmt werden, da die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons gewissermaßen innerhalb eines Volumens verschmiert ist. Darüber hinaus kann sich das Elektron ebenfalls an Orten befinden, die aus energetischer Sicht eigentlich verboten sind. Besitzen nun zwei mögliche Zustände eine Aufenthaltswahrscheinlichkeit am Ort \vec{r} , so ist es möglich, dass ein Elektron von einem Zustand in den anderen Zustand wechselt. Dabei skaliert die Wahrscheinlichkeit eines Übergangs mit der

2.1 Theorie und Funktionsweise eines Rastertunnelmikroskops

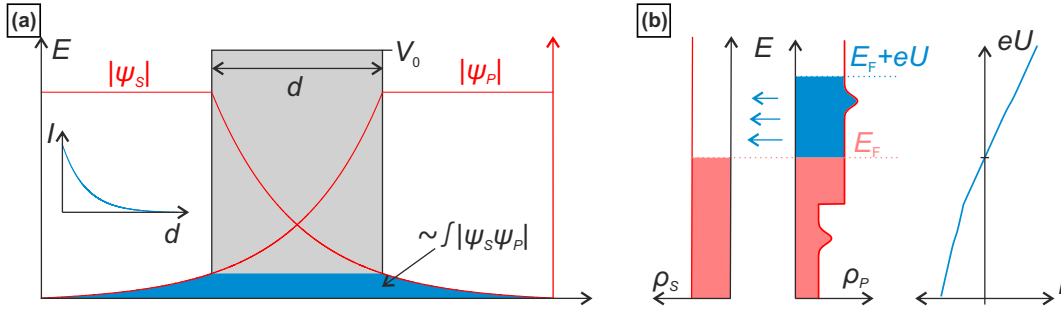


Abbildung 2.2: Schematische Darstellung der Wellenfunktionen und der am Tunnelstrom beteiligten Zustände (a) Überlapp der Wellenfunktionen in 1D. Der graue Bereich entspricht der Vakuumbarriere, die roten Funktionen der Spitzen- bzw. Probenwellenfunktionen. Der blaue Bereich markiert den Überlapp der Wellenfunktionen. (b) Übersicht der besetzten und unbesetzten Zustände in Abhängigkeit der BIAS Spannung, sowie der resultierende Tunnelstrom. (vgl. [12])

zeitlichen Ableitung des Integrals über das Produkt der Zustände:

$$j_{\Psi_S \leftrightarrow \Psi_P} \propto \frac{\partial}{\partial t} \int \Psi_S(\vec{r}') \Psi_P(\vec{r}') d\vec{r}'. \quad (2.1)$$

Dies ist in Abbildung 2.2(a) schematisch für den eindimensionalen Fall dargestellt. Die Wellenfunktion eines Teilchens innerhalb eines klassisch energetisch verbotenen Bereichs fällt exponentiell ab [14]. Aus diesem Grund ist der Überlapp der Wellenfunktionen von Spitze und Probe und damit die Übergangswahrscheinlichkeit ebenfalls exponentiell abhängig vom Abstand d . Diese Eigenschaft erklärt die sehr präzise Ortsauflösung eines Rastertunnelmikroskops. Wie in Gleichung 2.1 ersichtlich ist jedoch die Wahrscheinlichkeit eines Übergangs zwischen Spitze und Probe in beiden Richtungen gleich. Aus diesem Grund ergibt sich ausschließlich aufgrund des Überlapps der Wellenfunktionen kein Tunnelstrom. Dies führt direkt zur zweiten Voraussetzung für das Zustandekommen eines Tunnelstroms:

Elektronische Zustände können als Untergruppe der Fermionen je nach Betrachtung des Spins nur einfach bzw. doppelt besetzt werden [14]. Aus diesem Grund kann ein Elektron nur von der Spitze zur Probe tunneln, wenn ein im Tunnelprozess beteiligter Spitzenzustand durch das Elektron besetzt und ein Probenzustand bei gleicher Energie unbesetzt ist oder umgekehrt. Damit ergibt sich ein Tunnelstrom genau dann, wenn neben dem Überlapp der Wellenfunktionen ein statistisches Ungleichgewicht zwischen Besetzung der Spitzen- und Probenzuständen herrscht. Eine Möglichkeit zur Erzeugung und Kontrolle eben dieses Besetzungsungleichgewichts ist das Anlegen einer Potentialdifferenz U_B zwischen Spitze und Probe [12]. Ohne angelegte Spannung befinden sich die Fermi-Energien E_F innerhalb eines schwach wechselwirkenden Systems wie der Spitze bzw. der Probe auf gleichem

2 Theoretische Grundlagen des Rastertunnelmikroskops

Niveau [12]. Wird nun durch Anlegen einer Spannung zwischen Spitze und Probe eine Potentialdifferenz erzeugt, so verschieben sich die Fermi-Energien der Spitze und der Probe um $e \cdot U_B$, wie in Abbildung 2.2(b) dargestellt. Der resultierende Tunnelstrom I hängt somit sowohl von der Entfernung zwischen Spitze und Probe, wie auch der angelegten Spannung ab.

Quantitativ lässt sich der elastische Tunnelstrom zwischen einer Spitze und einer Probe quantenmechanisch wie folgt darstellen (vgl. z.B. [15, 16]):¹

$$I \propto \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{\sum_{\mu,\nu} \rho_\nu(\varepsilon - eU_B) \rho_\mu(\varepsilon)}_{\text{Zustandsdichte}} \underbrace{(f(\varepsilon - eU_B, T_\nu) - f(\varepsilon, T_\mu))}_{\text{Thermische Verbreiterung}} \underbrace{|M_{\mu,\nu}|^2}_{\text{Tunnelmatrixelement}} d\varepsilon \quad (2.2)$$

Hierbei entspricht $\rho_\mu(\varepsilon) = \delta(\varepsilon - \langle \Psi_\mu | H | \Psi_\mu \rangle)$ der Zustandsdichte eines einzelnen Zustands μ , $f(\varepsilon, T_\mu) = (1 + \exp(\frac{\varepsilon}{k_B T_\mu}))^{-1}$ der Fermi-Dirac-Verteilung bei der Temperatur T_μ und $M_{\mu,\nu}$ dem Übergangsmatrixelement von Zustand μ auf Zustand ν . Ohne Einschränkung der Allgemeingültigkeit werden im Folgenden die Zustände ν als Spitzenzustände und die Zustände μ als Probenzustände identifiziert. Die Einschränkung auf elastische Tunnelströme kann nach Bedarf durch eine zusätzliche Integration um inelastische Tunnelströme, also Übergänge zwischen Zuständen unterschiedlicher Energie, erweitert werden. Wie durch geschweifte Klammern angedeutet lässt sich der Gesamtstrom durch drei voneinander unabhängige Terme darstellen. Die Bedeutung der einzelnen Terme für den Tunnelstrom soll nun einzeln diskutiert werden.

Das Tunnelmatrixelement

Das Tunnelmatrixelement $|M_{\mu,\nu}|^2$ bildet im quantenmechanischen Tunnelstrom den Term, der den Einfluss der Übergangswahrscheinlichkeit aller beteiligten Spitzen- und Probenzuständen widerspiegelt. Während diese Übergangswahrscheinlichkeit, wie im eindimensionalen Fall mit zwei beteiligten Zuständen gezeigt, vergleichsweise einfach lösbar ist, gestaltet sich eine analytische Lösung im 3-dimensionalen Fall unter Einfluss aller beteiligten Zustände ohne Einschränkung als schwierig bis unmöglich. Die gängigste Beschreibung des Tunnelmatrixelements, die reale Messungen mitunter gut reproduziert, basiert auf den Berechnungen von Bardeen [19] mit Erweiterungen durch Tersoff und Hamann [17]. Da die genaue Berechnung in vielen Lehrbüchern und Dissertationen gefunden werden kann (z.B. [12]), soll hier nur die grundsätzliche Idee skizziert werden.

Der erste Schritt zur Lösung der Wahrscheinlichkeitsstromdichte $j_{\Psi_S \leftrightarrow \Psi_P}$ (Gl. 2.1)

¹Die Eigenschaft "elastisch" bezeichnet hierbei Prozesse bei denen Anfangs- und Endzustände die gleiche Energie besitzen.

2.1 Theorie und Funktionsweise eines Rastertunnelmikroskops

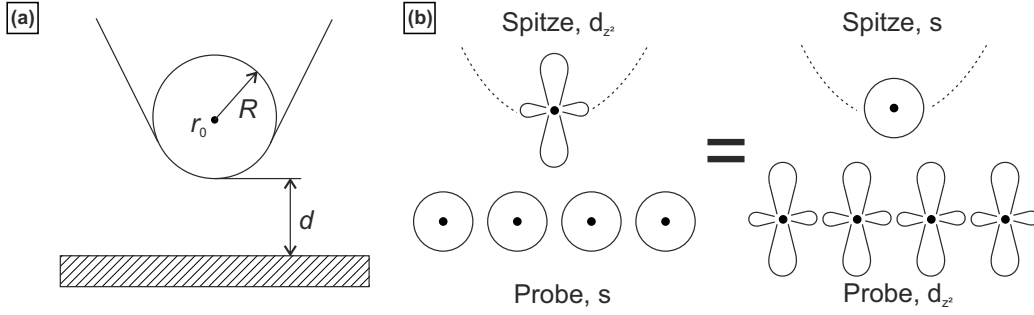


Abbildung 2.3: Schematische Darstellung der Spitze und Einfluss unterschiedlicher Orbitaltypen (a) Darstellung der Spitze (nach [17]). Für die Berechnung des Tunnelmatrixelements wird angenommen, dass die Spitze kugelförmig mit Radius R endet und einen Abstand von d zur Probe besitzt. (b) Darstellung der Wellenfunktionen von Spitze und Probe (nach [18]). Nach dem Gegenseitigkeitsprinzip sind die beiden dargestellten Fälle identisch.

besteht in der Anwendung von Fermis Goldener Regel, um aus der zeitlichen Ableitung die Übergangswahrscheinlichkeit zu bekommen [16]. Dabei wird die angelegte Spannung U_B als Störung des Gesamtsystems betrachtet, was die Anwendung der Vakuum-Schrödingergleichung auf die Wahrscheinlichkeitsstromdichte erlaubt. Der Vorteil dieser Formulierung liegt in der Ersetzung der zeitlichen Ableitung durch eine räumliche Integration über alle beteiligten Spitzen- und Probenzustände [19]:

$$M_{\mu,\nu} = \int_{\Omega} (\Psi_{\nu}^* \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi_{\mu} - \Psi_{\mu} \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi_{\nu}^*) dV. \quad (2.3)$$

Die Rechnung vereinfacht sich maßgeblich, wenn für die Spitze angenommen wird, dass sie kugelförmig mit Radius R endet und die beteiligten Wellenfunktionen s -artigen Charakter haben. Da somit die Spitzenzustände radialsymmetrisch sind, lässt sich die Spitzenwellenfunktion wie folgt darstellen [17]:

$$\Psi_{\nu} \propto R \exp(\kappa_{\nu} R) \frac{\exp(\kappa_{\nu}(r - r_0))}{\kappa_{\nu}(r - r_0)}. \quad (2.4)$$

Hierbei entspricht $\kappa_{\nu} = \hbar^{-1}(2m\Phi_{\nu})$, mit der Elektronenmasse m und der Austrittsarbeit des Spitzenmaterials Φ_{ν} . Da die Integration nun nicht mehr explizit vom Radius der Spitze R abhängig ist, kann durch die Verwendung der Green'schen Identität näherungsweise das Volumenintegral durch ein Oberflächenintegral ersetzt werden. Der Fehler durch die Näherung wird dabei minimal, wenn die Integrationsoberfläche Spitze und Probe symmetrisch trennt. Nach Ausführen der Integration ergibt sich, dass das Tunnelmatrixelement direkt proportional zur Probenwellenfunktion an der Position der Spitze r_0 ist [17]:

$$M_{\mu,\nu} \propto R \exp(\kappa R) \Psi_{\mu}(r_0). \quad (2.5)$$

2 Theoretische Grundlagen des Rastertunnelmikroskops

Für metallische Zustände mit hinreichend glatter Oberfläche lassen sich die Probenwellenfunktionen durch Bloch-Wellen approximieren, deren Wellenfunktion exponentiell im Vakuum abfällt. Unter dieser Voraussetzung lassen sich die Abhängigkeiten des Tunnelmatrixelements wie folgt schreiben:

$$|M_{\mu,\nu}| \propto \exp \left[-2\sqrt{\kappa_\mu^2 + |\kappa_G|^2}(d + R) \right] \exp[-2\kappa_\nu R], \quad (2.6)$$

mit dem Wellenvektor der Bloch-Welle parallel zur Oberfläche κ_G und der Definition des Abstands d aus Abbildung 2.3(a). Damit ergeben sich für das Tunnelmatrixelement folgende exponentielle Abhängigkeiten:

- der Radius der Spitzenkuppe R
- die Arbeitsfunktion der Spitze Φ_ν
- die Arbeitsfunktion der Probe Φ_μ
- der Abstand zwischen Spitze und Probe d
- die Länge des Wellenvektors parallel zur Oberfläche $|k_G|$

Unter Annahme einer Spitze mit einem Apex-Atom lässt sich je nach Material der Radius der Spitzenkuppe abschätzen. Ebenfalls sind die Arbeitsfunktionen für gängige Spitzen- und Probenmaterialien bekannt. Im Falle von Proben mit regelmäßiger Anordnung von Oberflächenatomen ergibt sich durch die exponentielle Abhängigkeit des Tunnelmatrixelements vom Wellenvektor parallel zur Oberfläche $|k_G|$ eine unterschiedliche Gewichtung von Zuständen im Tunnelstrom. So sind allgemein Zustände im Zentrum der Brillouin-Zone ($|k_G| \approx 0$) stärker gewichtet als Zustände am Rand der Brillouin-Zone ($k_G \approx \pi/a$, mit Gitterkonstante a). Da die Anschlussbedingung $d + R \rightarrow 0 : e^{\kappa(d+R)} \rightarrow 1$ jedoch fordert, dass im Falle verschwindenden Abstands die Gewichtung unabhängig von $|k_G|$ ist, bedeutet dies aber insbesondere auch, dass die Gewichtung bezüglich $|k_G|$ für geringeren Tunnelabstand schwächer ausfällt.

Als Beispiel lässt sich hierfür die atomare Korrugation von Edelmetalloberflächen anführen. Die Wellenfunktionen am Rand der Brillouin-Zone entsprechen stehenden Wellen und werden durch die schwach geladenen Atomrümpfe je nach Aufenthaltswahrscheinlichkeit energetisch separiert, was zum Entstehen einer Bandlücke führt (Modell der fast freien Elektronen). Da stehende Wellen ortsabhängige Intensitäten der Zustandsdichte besitzen, lässt sich diese Variation mithilfe des Rastertunnelmikroskops abbilden und wird in der Literatur als atomare Korrugation bezeichnet [17].

Die Stärke dieser Korrugation lässt sich unter Kenntnis der Gitterkonstanten a des untersuchten Materials in Abhängigkeit von d abschätzen. Dabei zeigt sich

schnell, dass die real gemessene Korrugation höher ausfiel als die von Tersoff und Hamann prognostizierte. Diese Diskrepanz konnte C. J. Chen 1990 [18] durch den Einfluss von p- und d-Spitzenorbitalen auf den Tunnelstrom erklären. Da die Ladungsverteilung in diesen Orbitaltypen nicht radialsymmetrisch ist, ergibt sich, wie in Abbildung 2.3(b) dargestellt, eine im Vergleich zu reinen s-Wellenfunktionen verkleinerte Barrierenbreite d .² Dabei spielt es keine Rolle, ob Spitzen- oder Probenzustände höhere Drehimpulsquantenzahlen besitzen.

Die Zustandsdichte

Die Zustandsdichte ρ (engl. density of states, DOS) beschreibt die Anzahl der Zustände Z innerhalb eines Phasenraumvolumens dV_k . Da in der Rastertunnelmikroskopie, im Gegensatz zu örtlich mittelnden Methoden wie zum Beispiel ARPES Messungen, nur indirekt auf den Wellenvektor \vec{k} geschlossen werden kann, wird die Zustandsdichte im Allgemeinen in Abhängigkeit der Energie formuliert. In diesem Fall gibt die Zustandsdichte an, wie viele Zustände sich innerhalb eines infinitesimalen Energieintervalls $\varepsilon + d\varepsilon$ befinden [20]. In der Darstellung von Gleichung 2.2 entspricht somit die Zustandsdichte der Probe ρ_P bzw. der Spitze ρ_S genau der Summe über alle Probenzustände bzw. Spitzenzustände $\rho_{P,S}(\varepsilon) = \sum_{\mu,\nu} \rho_{\mu,\nu}(\varepsilon)$. Da im realen Kristall, im Gegensatz zur analytischen Herleitung der Zustandsdichte z.B. eines freien Elektronengases, die Zustandsdichte nicht homogen innerhalb der Probe ist, werden in STM Messungen im Normalfall nur Aussagen über die lokale Zustandsdichte (LDOS) $\rho(\varepsilon) = \rho(\varepsilon, \vec{r})$, also die Zustandsdichte am Ort der STM Spitze, getroffen. Dies ist einerseits notwendig, da lokale Defekte wie Fehlstellen oder Fremdatome mitunter lang-reichweitige Modifikationen der LDOS zur Folge haben. Des Weiteren muss berücksichtigt werden, dass das Tunnelmatrixelement von der Intensität der Probenwellenfunktion am Ort der Spitze abhängt. Da unterschiedliche Probenzustände unterschiedliche Wellenfunktionen besitzen, kann damit die Gewichtung einzelner Zustände innerhalb des Tunnelstroms unterschiedlich ausfallen. Wie in Gleichung 2.2 zu sehen, lässt sich zusätzlich im Tunnelstrom nicht zwischen Zustandsdichte der Probe ρ_P und der Spitze ρ_S unterscheiden. Dies bedeutet insbesondere, dass in einer energieabhängigen Messung immer das Produkt beider Zustandsdichten gemessen wird. Um die Zustandsdichte der Probe separat zu bestimmen, ist es folglich notwendig, dass die Zustandsdichte der Spitze weitgehend konstant oder zumindest bekannt ist. Da die Zustandsdichte mitunter auch stark von der Spitzengeometrie abhängt, wird deshalb jede Spitze auf einem Referenzmaterial mit bekannter Zustandsdichte getestet. Dies ist in den meisten Fällen eine Edelmetalloberfläche wie Cu(111) oder Ag(111) mit bekannten

²Dieses Bild dient nur der Veranschaulichung, da der Übergang von s- in d-Zustände eine Drehimpulsänderung von $2\hbar$ impliziert. Dies ist im elastischen Tunnelstrom nicht möglich und im inelastischen Tunnelstrom zumindest sehr unwahrscheinlich.

2 Theoretische Grundlagen des Rastertunnelmikroskops

topographischen wie spektroskopischen Eigenschaften.

Die thermische Verbreiterung

Der letzte Einflussfaktor auf den Tunnelstrom ist die energetische Verbreiterung eines spektroskopischen Merkmals durch die vorherrschende Temperatur. Wie bereits diskutiert ist für das Entstehen eines Tunnelstroms ein Besetzungsgleichgewicht zwischen Spitzen- und Probenzuständen erforderlich, welches durch die BIAS-Spannung U_B kontrolliert werden kann. Während theoretisch bei 0 K die Besetzung der Zustände einer Stufenfunktion entspricht, also alle Zustände bis zur Fermi-Energie E_F (oder bei angelegter Spannung $U_B + E_F$) besetzt sind und alle darüber liegenden unbesetzt, können bei Temperaturen $T \geq 0$ K ebenfalls Zustände unterhalb dieser Energien unbesetzt bzw. oberhalb besetzt sein. Die genaue Besetzungswahrscheinlichkeit von Zuständen in Abhängigkeit der Energie und der Temperatur gehorcht im Fall von Elektronen mit halb-zahligem Spin der Fermi-Dirac-Statistik $f_{S,P}(\varepsilon) = (1 + \exp(\frac{\varepsilon}{k_B T}))^{-1}$. Dies bedeutet aber, dass ein energetisch Delta-förmiger Probenzustand ebenfalls Beiträge zum Tunnelstrom unterhalb und oberhalb seiner eigentlichen Energie liefert. Die daraus resultierende Energieauflösung einer Messung ergibt sich zu [21]:

$$\Delta E \approx 3.2k_B T. \quad (2.7)$$

Dementsprechend wäre ein energetisch scharfes Merkmal in der Zustandsdichte einer Probe bei Raumtemperatur um $\Delta E|_{273K} \approx 75$ meV verbreitert, während die Verbreiterung bei 4 K nur $\Delta E|_{4K} \approx 1$ meV beträgt. Da Spitze und Probe zwei separate thermische Systeme darstellen, die nicht notwendigerweise in gutem thermischen Kontakt stehen, lässt sich ähnlich wie bei der Zustandsdichte bei Unkenntnis der energetischen Eigenschaften von Spitze und Probe nicht zwischen thermischer Verbreiterung der Probe und der Spitze unterscheiden.

2.2 Messmethoden in der Rastertunnelmikroskopie

Nachdem im letzten Kapitel die theoretischen Grundlagen zur Interpretation des Tunnelstroms geschaffen wurden, soll hier auf die gängigsten Messmethoden innerhalb der Rastertunnelmikroskopie eingegangen werden.

2.2.1 Topographische Messung

Bei topographischen Messungen wird die Spitze bei konstanter Spannung ähnlich einer Rastergrafik über eine Punktmatrix in der xy -Ebene gerastert. Für jeden

2.2 Messmethoden in der Rastertunnelmikroskopie

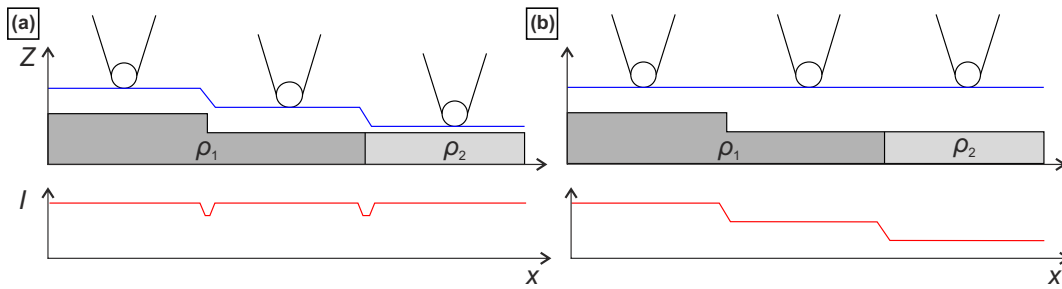


Abbildung 2.4: Vergleich unterschiedlicher topographischer Messmethoden Verlauf der Spitzenposition z und des Tunnelstroms I bei Messungen mit konstantem Tunnelstrom (a) und konstanter Höhe (b). Da die Spitze-Probe-Abstände für beide Fälle unterschiedlich sind, lassen sich Ergebnisse unterschiedlicher Messmethoden nur eingeschränkt vergleichen. Im gegebenen Fall gilt für die Zustandsdichten $\rho_1 > \rho_2$.

Punkt wird die z -Position sowie der Tunnelstrom gemessen, wobei grundsätzlich zwischen zwei Arten von Messungen unterschieden wird: Messungen mit konstantem Tunnelstrom und Messungen mit konstanter Höhe. Beide Messmethoden sind in [Abbildung 2.4](#) schematisch dargestellt.

Bei Messungen mit konstantem Tunnelstrom wird, wie der Name schon andeutet, der Tunnelstrom zwischen Spitze und Probe konstant gehalten. Da der Tunnelstrom exponentiell vom Abstand zwischen Spitze und Probe abhängt, bedeutet dies, dass die Höhe der Spitze ständig korrigiert werden muss. Dies geschieht unter Verwendung eines PI-Controllers (proportional-integral), der während der Messung den Tunnelstrom auf Abweichungen prüft und die Höhe der Spitze so anpasst, dass der Tunnelstrom wieder den eingestellten Wert erreicht. Da der Tunnelstrom somit weitgehend konstant gehalten wird, ist die Messgröße in diesem Fall die z -Koordinate. Der Vorteil dieser Messmethode ist, dass selbst sehr unebene Probenoberflächen sicher vermessen werden können, da der Scanner auf Unebenheiten reagiert und die Gefahr einer Kollision zwischen Spitze und Probe somit verringert wird. Durch die Verwendung eines Regelkreises kann es jedoch passieren, dass unter ungünstiger Wahl der Parameter eine Schwingung in die Spitze induziert wird. Im Gegensatz dazu wird bei Messungen mit konstanter Höhe die z -Position des Scanners während des Rastervorgangs fixiert. Hierbei ändert sich durch Unebenheiten der Probenoberfläche und damit des Spitze-Probenabstands oder Bereiche unterschiedlicher Zustandsdichte der Tunnelstrom, der in dieser Art der Messung die Messgröße darstellt. Da der Tunnelstrom jedoch exponentiell vom Abstand abhängt kann es hierbei leicht passieren, dass bereits leichte Abweichungen im Abstand zu einer Änderung des Tunnelstroms um mehrere Größenordnungen führen. Aus diesem Grund sind Messungen mit konstanter Höhe nur auf sehr flachen Probenoberflächen möglich. Der Vorteil einer Messung mit konstanter Höhe ist die erhöhte Messgeschwindigkeit, da die z -Regelung in diesem Fall entfällt.

2 Theoretische Grundlagen des Rastertunnelmikroskops

Abschließend ist zu bemerken, dass die Ergebnisse beider Messmethoden nicht äquivalent sind. Da in beiden Messmethoden unterschiedliche Spitzen-Probenabstände gefahren werden, kann sich die Zusammensetzung der zum Tunnelstrom beitragenden Zustände ändern. So ist zum Beispiel der exponentielle Abfall der Wellenfunktion eines $5s$ -Zustands im Vakuum geringer als der eines $5d_{z^2}$ -Zustands, womit für größeren Spitze-Probe-Abstand d die Gewichtung des s -Zustands zum Tunnelstrom steigt.

2.2.2 Spektroskopische Messung

Im Gegensatz zu topographischen Messungen wird bei spektroskopischen Messungen der Tunnelstrom in Abhängigkeit der BIAS-Spannung gemessen. Diese Art der Messung gibt direkt Rückschlüsse auf die lokale Zustandsdichte der Probe. Dies lässt sich einfach durch das Differenzieren des Tunnelstroms aus Gleichung 2.2 nach der Spannung zeigen, was im Folgenden am Beispiel einer Spitzen-seitig angelegten Spannung ($\rho_\nu \in \rho_S$) demonstriert werden soll:

$$\begin{aligned} \frac{\partial I}{\partial U_B} &\propto \frac{\partial}{\partial U_B} \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{\mu,\nu} \rho_\mu(\varepsilon) \rho_\nu(\varepsilon - eU_B) (f(\varepsilon - eU_B, T_\nu) - f(\varepsilon, T_\mu)) |M_{\mu,\nu}|^2 d\varepsilon \\ &\propto \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{\mu,\nu} \rho_\mu |M_{\mu,\nu}|^2 \left[\rho_\nu(\varepsilon - eU_B) \frac{\partial f(\varepsilon - eU_B, T_\nu)}{\partial U_B} \right. \\ &\quad \left. + \frac{\partial \rho_\nu(\varepsilon - eU_B)}{\partial U_B} (f(\varepsilon - eU_B, T_\nu) - f(\varepsilon, T_\mu)) \right] \end{aligned} \quad (2.8)$$

Bezüglich der Ableitung ergeben sich zwei Terme. Während die Ableitung der Fermifunktion für niedrige Temperaturen näherungsweise der Deltafunktion entspricht:

$$\lim_{T_\nu \rightarrow 0} \left(\frac{\partial f(\varepsilon - eU_B, T_\nu)}{\partial U_B} \right) = \delta(\varepsilon - eU_B),$$

hängt der zweite Term von der Ableitung der Zustandsdichte der Spitzenzustände ab. Wählt man für die Spitze nun Materialien, deren Zustandsdichte im Energiebereich der spektroskopischen Messungen nahezu konstant ist $\frac{\partial \rho_\nu(\varepsilon - eU_B)}{\partial U_B} \approx 0$, so entfällt der zweite Term und es lässt sich zeigen, dass die Ableitung des Tunnelstroms nach der Tunnelspannung proportional zur Zustandsdichte der Probe ist:³

$$\frac{\partial I}{\partial U_B} \propto \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{\mu,\nu} \rho_\nu \rho_\mu(\varepsilon) \delta(\varepsilon - eU_B) |M_{\mu,\nu}|^2 = \sum_{\mu,\nu} \rho_\nu \rho_\mu(eU_B) |M_{\mu,\nu}|^2. \quad (2.9)$$

³Eine analoge Rechnung mit Probenseitig angelegter Spannung gestaltet sich schwieriger, da hierbei die Einschränkung des Spitzenmaterials keine Vereinfachung der Berechnung mit sich bringt. Erfahrungsgemäß zeigen sich jedoch keine signifikanten Unterschiede in Messungen mit Spitzen- und Probenseitig angelegter BIAS-Spannung.

2.2 Messmethoden in der Rastertunnelmikroskopie

Wie ebenfalls deutlich wird, hängt die Ableitung des Tunnelstroms nach der Spannung jedoch nicht ausschließlich von der Zustandsdichte der Probe, sondern ebenfalls von der Zustandsdichte der Spitze wie auch vom Tunnelmatrixelement, ab. Damit bietet sich in spektroskopischen Messungen die Möglichkeit durch geeignete Wahl des Spitzenmaterials die Gewichtung einzelner Probenzustände innerhalb der Spektroskopie zu verändern, was zum Beispiel dazu verwendet werden kann, Spin-abhängige Messungen innerhalb der Rastertunnelmikroskopie durchzuführen [12].

Da die Ableitung einer Funktion auf dem Differenzenquotient zweier Messwerte basiert, ist aufgrund der Gesetze zur Fehlerfortpflanzung leicht ersichtlich, dass die Unsicherheit der Ableitung des Tunnelstroms weit höher ist als die des Tunnelstroms selbst. Aus diesem Grund wird in spektroskopischen Messungen heutzutage fast ausschließlich die sogenannte Lock-In Technik verwendet (vgl. Abbildung 2.5). Dazu wird mithilfe eines Lock-In Verstärkers eine hochfrequente Sinus-Spannung $U_m \sin(\omega t)$ auf die BIAS-Spannung addiert. Unter Berücksichtigung dieser Spannung lässt sich der Tunnelstrom als Taylorreihe um die BIAS-Spannung entwickeln [15]:

$$I(U_B + U_m \sin(\omega t)) \approx I(U_B) + \frac{dI(U_B)}{dU} U_m \sin(\omega t) + \frac{1}{2} \frac{d^2 I(U_B)}{dU^2} U_m^2 \sin^2(\omega t) + \dots$$

Dabei wird deutlich, dass die erste Ableitung des Tunnelstroms mit der gleichen Frequenz wie die Anregungsfrequenz moduliert ist. Der Vorteil in der Verwendung des Lock-In Verstärkers liegt nun darin, dass das resultierende Tunnelstromsignal hinsichtlich des Referenzsignals ausgewertet werden kann. Dazu wird der Tunnelstrom mit einem phasenverschobenen Referenzsignal multipliziert und dann durch einen Tiefpassfilter geglättet. Während der dI/dU -Anteil des Tunnelstroms den Tiefpassfilter ungehindert passiert, werden alle Störungen deren Frequenz von der

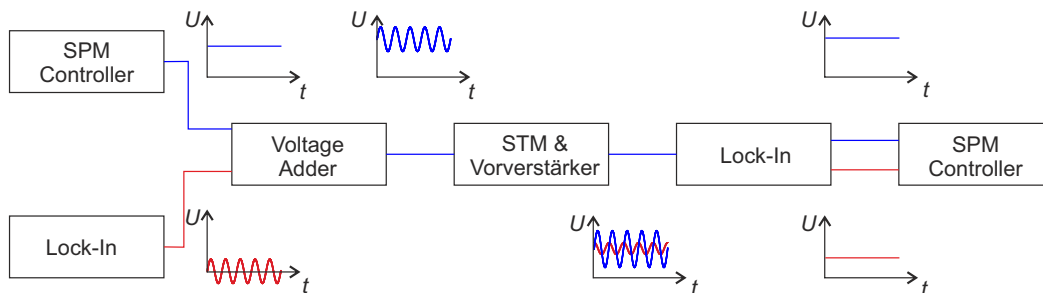


Abbildung 2.5: Schematische Darstellung des Aufbaus in der Lock-In Technik. Auf die BIAS Spannung wird eine schwache Modulationsspannung addiert. Das STM reagiert hierauf mit einer Modulation des Tunnelstroms sowie einer kapazitiven Kopplung. Da beide überlagerten Signale um 90° phasenverschoben sind, kann der Lock-In Verstärker die Intensitäten der einzelnen Signale getrennt ausgeben.

2 Theoretische Grundlagen des Rastertunnelmikroskops

des Referenzsignals abweicht, im Filter gedämpft. Durch eine geeignete Wahl der Anregungsfrequenz kann somit das Signal-Rausch-Verhältnis innerhalb der Spektroskopie deutlich gesteigert werden.

Die Verwendung der Lock-In Technik bringt jedoch nicht nur Vorteile mit sich. So ist eine Folge der überlagerten Wechselspannung ein Blindstrom durch die kapazitive Kopplung zwischen Spitze und Probe. Dieser beeinflusst durch eine Phasenverschiebung von 90° zum dI/dU -Signal zwar nicht die Spektroskopie, kann je nach Frequenz, Amplitude, Spitzen- und Probenmaterial aber bis zu mehreren Pikoampère betragen und damit unter Umständen zu Störungen des PI-Controllers führen. Dies ist einer der Gründe, warum Spektroskopien üblicherweise im Konstante-Höhe-Modus durchgeführt werden. Dabei wird der Spitze-Probe-Abstand bei einer gegebenen Spannung auf einen definierten Tunnelstrom fixiert und der PI-Controller während der Messung abgeschaltet. Ein weiterer Nachteil der Lock-In Technik ist eine Reduzierung der Energieauflösung abhängig von der Intensität der Wechselspannung. Neben der Limitierung durch die Proben temperatur (Gleichung 2.7) addiert sich in diesem Fall ein weiterer von der Modulationsamplitude abhängiger Term und die Energieauflösung ergibt sich zu [21]:

$$\Delta E \approx \sqrt{(3.2k_B T)^2 + (\alpha e U_{m,RMS})^2}. \quad (2.10)$$

$U_{m,RMS}$ bezieht sich hierbei auf die effektive Spannung (eng.: root mean square), der Wert des Vorfaktors α schwankt in der Literatur zwischen $1.8 \leq \alpha \leq 2\sqrt{2}$ [21–23].

2.2.3 Zustandsdichtekarten und Quasi-Teilchen-Interferenz

Da unter Verwendung der Lock-In Technik die Zustandsdichte gleichzeitig mit der Topographie erfasst werden kann, ergibt sich eine weitere Messmethode: Die Abbildung von Zustandsdichtekarten. Während für die topographische Messung nur der Gesamt-tunnelstrom eine Rolle spielt, kann durch die Lock-In Technik zusätzlich die Zustandsdichte der verwendeten BIAS-Spannung $\rho(eU_B + E_F)$ lokal aufgelöst werden. Damit lassen sich lokale Variationen der Zustandsdichte bei einer gegebenen Spannung darstellen.

Eine mögliche lokale Änderung der Zustandsdichte bildet die Quasi-Teilchen-Interferenz (engl. quasi particle interference, QPI) [24]. Notwendig für das Auftreten von QPI ist das Vorhandensein von lokalen Potentialstörungen wie z.B. Defekten oder Stufenkanten. Trifft ein Elektron auf eine solche Potentialstörung, kommt es zur Streuung des Elektronenzustands am Potential, vergleichbar mit der Tunnelwahrscheinlichkeit durch eine eindimensionale Rechteckbarriere (vgl. [13]). Abhängig von der genauen Form der Potentialstörung kommt es somit mit einer

2.2 Messmethoden in der Rastertunnelmikroskopie

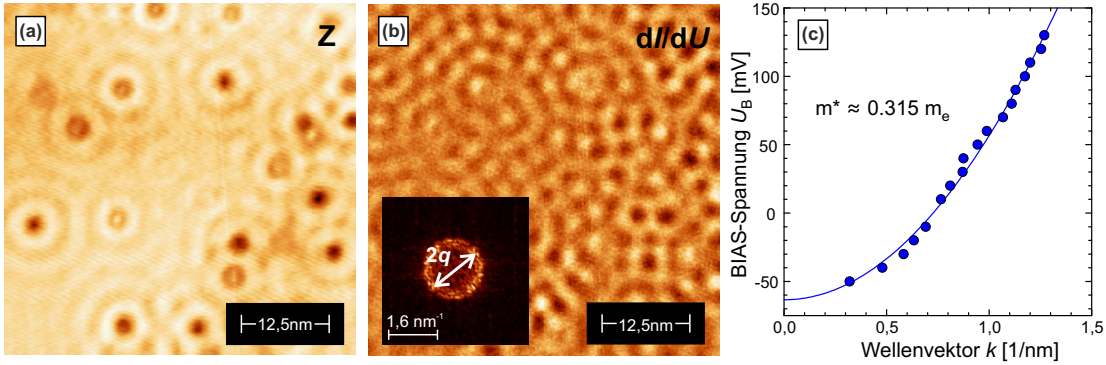


Abbildung 2.6: Beispiel der Bestimmung der effektiven Elektronenmasse aus QPI-Daten. (a) Topographie einer Ag(111)-Oberfläche bei konstantem Tunnelstrom $I = 150 \text{ pA}$, $U_B = 30 \text{ mV}$. (b) Gleichzeitig aufgenommene Zustandsdichtekarte mit $U_{\text{mod}} = 3 \text{ mV}$. Der Inset zeigt die 2D-Fouriertransformation der Zustandsdichtekarte. (c) Parabolische Dispersionsrelation der Ag(111)-Oberflächenzustände. Jeder Wert entspricht hierbei der Hälfte des Kreisradius der QPI-Resonanz bei der Spannung U_B .

gewissen Wahrscheinlichkeit zur Transmission oder zur Reflexion der Elektronenwellenfunktion. Da sich für den Fall der Reflexion nun die einlaufende und die reflektierte Wellenfunktion überlagern, bilden sich stehende Wellen mit einer Wellenlänge $\vec{q} = \vec{k}_{\text{ein}} - \vec{k}_{\text{aus}}$. Da stehende Wellen zeitlich stabile lokale Maxima und Minima besitzen, lassen sich diese Variationen in der ortsaufgelösten Zustandsdichte detektieren und die Streuwellenlänge q bestimmen. Unter der Annahme elastischer Rückstreuung $k_{\text{ein}} = -k_{\text{aus}}$ lässt sich daraus der Wellenvektor des elektronischen Zustands ableiten und unter Annahme einer näherungsweise parabolischen Zustandsdichte und Messungen bei mehreren unterschiedlichen Spannungen eine effektive Elektronenmasse m^* bestimmen [20]:

$$U_B \approx E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \Rightarrow m^* = \frac{2E}{\hbar^2 k^2} \quad (2.11)$$

Zur Veranschaulichung dieser Art der Messung zeigt Abbildung 2.6 eigene Messungen zur Bestimmung der Elektronenmasse einer Ag(111) Oberfläche. Abbildung (a) zeigt dabei eine Topographieaufnahme eines Bereichs der Oberfläche mit mehreren Defekten. Wie in Abbildung (b) zu erkennen, bilden sich in der dI/dU -Messung wellenförmige Muster, deren Fouriertransformation einem Kreis mit Radius $|q|$ entspricht. Trägt man für mehrere Messungen den daraus resultierenden Wellenvektor k gegen die BIAS-Spannung U_B der dI/dU -Messung auf, so ergibt sich eine quadratische Dispersion aus der sich die effektive Elektronenmasse m^* bestimmen lässt (vgl. (c)). Die gemessene effektive Masse liegt mit 0.315 Elektronenmassen signifikant unter dem in der Literatur angegebenen Wert von ungefähr 0.4 Elektronenmassen [25, 26], was eine Fehlkalibrierung des Röhrens-

2 Theoretische Grundlagen des Rastertunnelmikroskops

canners in xy -Richtung nahelegt. Somit bildet diese Art der Messung neben der Vermessung der Gitterabstände bei atomarer Auflösung eine weitere Möglichkeit zur Kalibrierung des Röhrencanners.

3 Design und Aufbau des 1K-STM

3.1 Kryostat

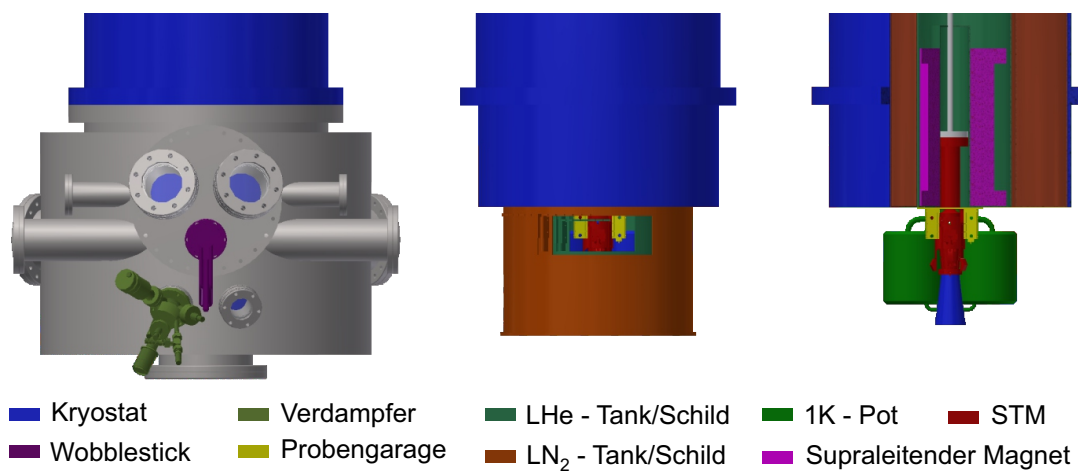


Abbildung 3.1: 3D-Modell des Kryostaten mit und ohne angepasste UHV-Kammer. Links: Kryostat mit angepasster Vakuumkammer. Der Verdampfer ist dabei so ausgerichtet, dass durch Löcher in den Strahlungsschilden (nicht eingezeichnet) direkt auf die Probe im STM aufgedampft werden kann. Mitte: Kryostat ohne Vakuumkammer. Die LN₂- und LHe-Schilde sind dabei geöffnet. Rechts: 3/4-Schnitt durch den Kryostaten zur Veranschaulichung der inneren Struktur. Wichtige Komponenten sind farblich markiert und in der Legende beschriftet.

Der individuell von CryoVac[®] [27] auf unsere Bedürfnisse angefertigte Kryostat basiert auf dem Konzept eines Badkryostaten. Bei einem Badkryostaten wird die thermische Entkopplung des zu kühlenden Objekts durch eine zwiebelschalenförmige Anordnung von thermischen Isolierungen und Zwischenstufen realisiert, wie in Abbildung 3.1 für unseren Kryostaten veranschaulicht. Die innerste Schicht bildet in unserem Fall ein Heliumtank mit einem Fassungsvermögen von 50l Flüssig-Helium (LHe) bei einer Basistemperatur von 4.2K. Der Heliumtank wird von einem Strahlungsschild nach außen abgeschirmt, das auf beiden Seiten durch eine Vakuumbarriere isoliert ist und durch abdampfendes Helium aus dem Heliumtank gekühlt wird. Um das Strahlungsschild des Heliumtanks befindet

3 Design und Aufbau des 1K-STM

sich der Hohlzylinder-förmige Stickstofftank mit ebenfalls einem Fassungsvermögen von ca. 50l Flüssigstickstoff (LN_2) bei einer Basistemperatur von 77 K. Der Stickstofftank ist ebenfalls von einem Strahlungsschild umgeben, das in diesem Fall von abdampfendem Stickstoff gekühlt wird. Dieses Strahlungsschild ist wiederum auf beiden Seiten durch eine Vakuumbarrriere thermisch isoliert. Ziel eines solchen Aufbaus ist es, den thermischen Eintrag insbesondere durch Infrarotstrahlung auf den Heliumtank möglichst gering zu halten. Da die Strahlungsenergie nach dem Stefan-Boltzmann-Gesetz mit T^4 skaliert [28], verringert allein die Ummantelung des Heliumtanks durch den Stickstofftank die eingebrachte Wärme auf unter 1%. Da flüssiger Stickstoff mit 5.56 kJ/mol [29] eine um ein vielfaches höhere Verdampfungsenthalpie besitzt als flüssiges Helium (0.0840 kJ/mol [29]), kann die gleiche Menge an flüssigem Stickstoff bei Verdunstung eine wesentlich größere Wärmemenge aufnehmen, wodurch die Standzeiten beider Tanks, also die Zeit bis die gesamte Kryoflüssigkeit verdampft ist, ähnlich lang sind. Im Fall des 1K-Systems beträgt diese Standzeit ungefähr vier Tage.

Zusätzlich ist innerhalb des LHe-Schildes eine Probengarage für bis zu acht Proben angebracht. Die Position der Probengarage bietet dabei zahlreiche Vorteile. So können zum Beispiel Proben, deren Grenzenergie für die Bildung von Oberflächenrekonstruktionen unter der thermischen Energie bei Raumtemperatur liegt, für wiederholte Messungen bei unter 10 K gelagert werden. Darüber hinaus ist das Vakuum innerhalb des LHe-Schildes durch dessen Wirkung als Kryopumpe wesentlich besser als in einer außerhalb angebrachten Garage. Damit verlängert sich zum Beispiel die Zeitspanne in der für die Spitzenbearbeitung wichtige Referenzproben wie Ag(111) oder Cu(111) ohne erneute Präparation verwendet werden können.

3.1.1 1K-Pot

Für STM-Messungen mit besonders hoher Energieauflösung ist innerhalb des Kryostaten zusätzlich ein 1K-Pot installiert, der die Basistemperatur des STMs auf bis zu 1.4 K reduzieren kann. Wie in Kapitel 2.1.1 beschrieben, lässt sich hierdurch die Energieauflösung theoretisch um einen Faktor 3 auf $\approx 500 \mu\text{V}$ verbessern. Die Funktionsweise des 1K-Pot lässt sich dabei wie folgt beschreiben (vgl. [30, 31]): Bei Raumdruck liegen die flüssige und gasförmige Phase von Helium bei 4.2 K im Gleichgewicht. Gleichgewicht bedeutet hierbei, dass genau so viel flüssiges Helium verdampft, wie gasförmiges Helium kondensiert. Wird nun der Druck innerhalb des Systems bei gleichem Volumen reduziert, so verdampft mehr Helium, was durch die dafür benötigte Verdampfungswärme zu einer Reduzierung der inneren Energie innerhalb der Flüssigkeit führt. Wird das 'heiße' Heliumgas nun abgepumpt, so wird dem System Energie entzogen und die Temperatur der Flüssigkeit sinkt bis wieder ein Gleichgewicht zwischen flüssiger und gasförmiger Phase entsteht. Damit skaliert die Temperatur des Systems mit dem anliegenden Druck und es

können im Fall von flüssigem He_4 Temperaturen unter 1 K erreicht werden. Da die Kühlleistung jedoch wiederum vom anliegenden Druck abhängt, nimmt die Kühlleistung mit sinkender Temperatur ab. Durch den zusätzlichen Eintrag an Wärme über die mechanischen Verbindungen des 1K-Pots ergibt sich damit das thermische Gleichgewicht bereits bei höheren Temperaturen, im Fall des 1K-Systems für die Probertemperatur bei $\approx 1.4 - 1.5$ K.

3.1.2 Supraleitender Magnet

Um Probensysteme unter Einfluss eines Magnetfeldes zu untersuchen, ist innerhalb des Heliumtanks ein kommerzieller supraleitender Magnet verbaut. Kern des Magneten bilden eine Spule aus Nb_3Se mit einem kritischen Feld von über 22 T bei 4.2 K, umgeben von einer NbTi Spule mit einem kritischen Feld von 12 T [32]. Unter Normalbetrieb bei 4.2 K beträgt das aufgrund der Geometrie des Magneten maximal anlegbare Feld 12.5 T bei 120 A Spulenstrom. Die Orientierung des Feldes ist hierbei senkrecht zur Probenoberfläche. Die Verwendung eines supraleitenden Magneten bringt im Vergleich zu einem normalleitenden Magneten einige Vorteile mit sich. So lässt sich durch den verschwindenden elektrischen Widerstand eines Supraleiters das Magnetfeld auch ohne externe Stromzufuhr aufrechterhalten, was die Wahrscheinlichkeit elektrischer Störungen durch das Steuergerät des Magneten während einer Messung verringert. Des Weiteren kann die geometrische Ausdehnung des Magneten durch den Einbau innerhalb des Heliumtanks stark verringert werden, was die Homogenität des Magnetfelds innerhalb der Spule deutlich erhöht. So beträgt die Homogenität des verbauten Magneten im Kernfeld innerhalb einer Kugel mit 10 mm Durchmesser $< 0.1\%$ Abweichung, also weniger als 12.5 mT bei einem maximalen Magnetfeld von 12.5 T [33].

Ein Nachteil in der Benutzung eines supraleitenden Magneten liegt jedoch darin, dass zu jeder Zeit die Spulentemperatur unterhalb der kritischen Temperatur des verwendeten Materials liegen muss. Dafür muss sichergestellt werden, dass der Magnet während der Benutzung vollständig von LHe umgeben ist und während des Lade- und Entladevorgangs die normalleitenden Zuleitungen ebenfalls ausreichend gekühlt werden. Durch den dafür notwendigen Mindestspiegel an LHe reduziert sich die Messzeit bei angelegtem Magnetfeld auf schätzungsweise 1.5 Tage. Theoretisch ist es durch das Absenken der Temperatur im Heliumtank, insbesondere unter den Lambda-Punkt von LHe (Temperatur an der He^4 suprafluid wird), möglich höhere Magnetfelder als 12.5 T zu fahren [33], dies wurde jedoch im Rahmen dieser Arbeit nicht getestet.

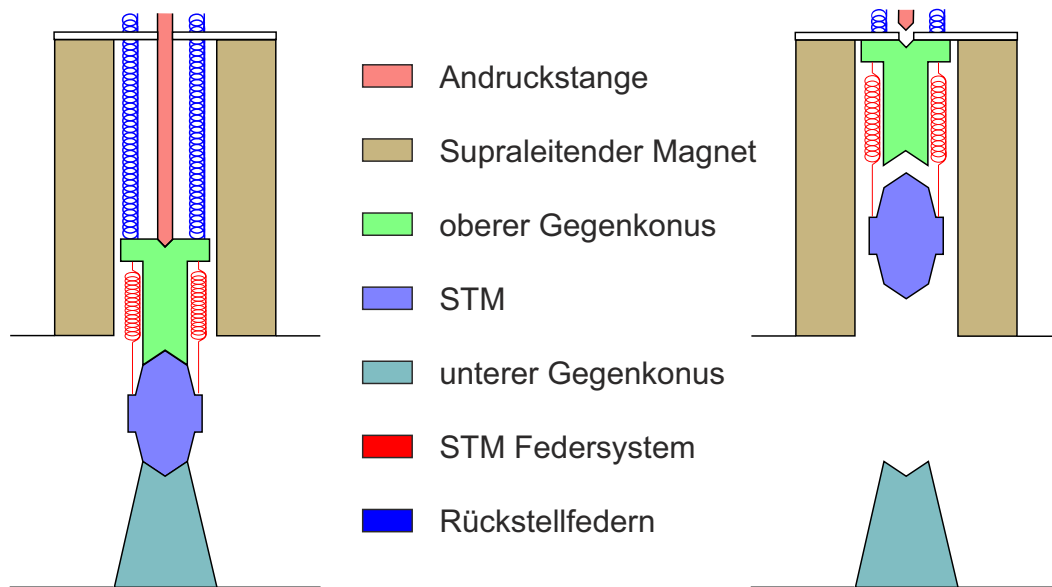


Abbildung 3.2: Schematische Darstellung der relevanten Positionen des STM. Links: Austauschposition in der das STM stabil arretiert ist und Spitzen- und Probenwechsel durchgeführt werden können. Rechts: Messposition mit der Möglichkeit ein externes Magnetfeld anzulegen und die Proben temperatur auf bis zu 1.5 K zu reduzieren.

3.2 Mechanische Ankopplung des STM

Durch die Geometrie des verbauten Magneten ist ein Zugang nur über die vertikale Achse möglich. Damit ist jedoch der Austausch einer Probe oder Spitze bei einer festen STM Konstruktion innerhalb des Magneten nicht möglich. Aus diesem Grund wurde die Ankopplung des STM an den Kryostaten in Zusammenarbeit mit CryoVac[®] beweglich konstruiert. Wie in Abbildung 3.2 schematisch dargestellt existieren demnach zwei Positionen: In der einen Stellung ist das STM federgedämpft im Zentrum des Magneten positioniert (im Folgenden Messposition genannt) und in der anderen ist das STM stabil unterhalb des Magneten mit Zugang von außen arretiert (Austauschposition).

Um den thermischen Eintrag wie auch den Schwingungseintrag auf das STM in der Messposition so gering wie möglich zu halten, wurde die Ankopplung so konstruiert, dass die Bewegungsvorrichtung in der Messposition vom STM entkoppelt ist. Um dies zu realisieren, sind innerhalb des Kryostaten drei Federn verbaut, die den oberen Gegenkonus an die abgeschlossene Oberseite des Magneten ziehen und damit eine stabile Position ermöglichen. Um das STM in die untere Position zu bringen, ist auf der Oberseite des Kryostaten eine Linearverschiebung mit einer Andruckstange installiert, mit der der obere Gegenkonus mitsamt STM nach unten verschoben werden kann. Zur Gewährleistung der Stabilität in der Austauschpo-

3.3 Thermische Ankopplung des STM

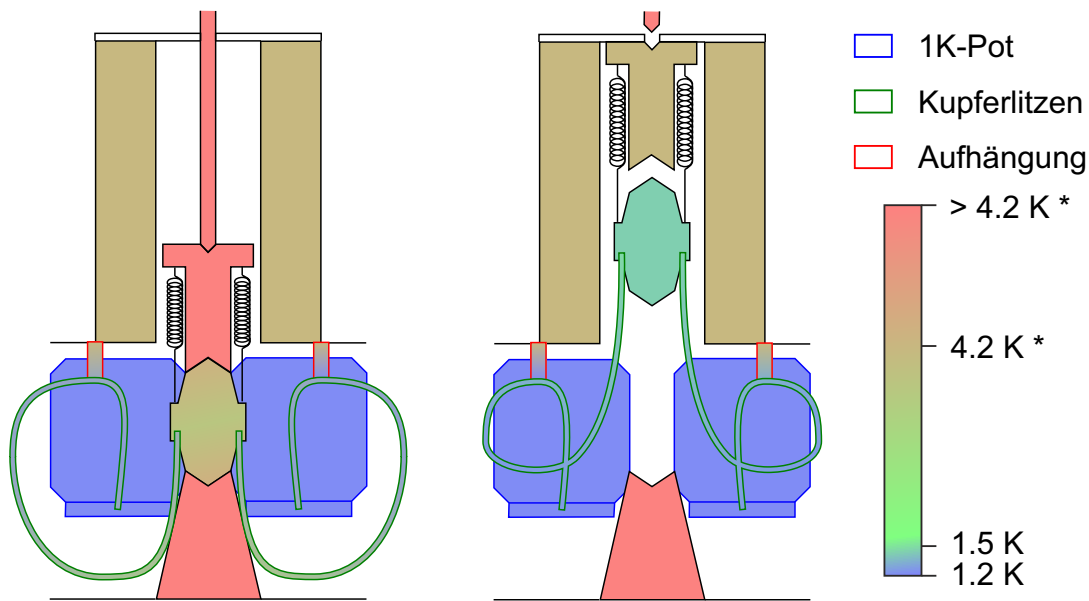


Abbildung 3.3: Schematische Darstellung der thermischen Ankopplung und der Temperaturverteilung. Links: Austauschposition: Die thermische Ankopplung geschieht hauptsächlich durch die Gegenkoni. Rechts: Messposition: Die thermische Ankopplung besteht weitgehend aus der Federaufhängung und den Kupferlitzen.

sition ist an der Oberseite des Heliumschilde ein weiterer Gegenkegel angebracht, sodass das konisch geformte STM in dieser Position zwischen den beiden Gegenkegeln eingeklemmt werden kann. Da das Federsystem des STM in dieser Position deaktiviert ist, kann eine Kraft senkrecht zur Aufhängungsachse angewandt werden, was zum Beispiel für den Wechsel von Proben im STM erforderlich ist.

3.3 Thermische Ankopplung des STM

Durch die bewegliche Konstruktion des STM muss die thermische Ankopplung zwischen STM und 1K-Pot ebenfalls flexibel gestaltet werden. Aus diesem Grund wurden hochflexible Kupferlitzen der Firma Haarländer [34] verbaut. Der Durchmesser jeder Litze beträgt ca. 1.25 mm und besteht aus 392 Einzeldrähten mit je 0.05 mm Durchmesser. Für eine geordnete Bewegung wurden jeweils 5 Litzen zu einem Band verflochten, in das ebenfalls die elektrische Verkabelung des STM integriert wurde. Die Einbindung der elektrischen Verkabelung hat einerseits den Vorteil, dass die Bewegung der Verkabelung ebenfalls kontrollierbar vorstattengeht, darüber hinaus werden die Kabel durch die große thermische Ankopplung innerhalb der Litzen gut gekühlt und durch die Verwebung zusätzlich elektrisch abgeschirmt.

3 Design und Aufbau des 1K-STM

Die Aufhängung der Kupferbänder ist in Abbildung 3.3 schematisch dargestellt. Die zusätzlichen Aufhängungen an der Unterseite des Kryostaten wirken sich zwar leicht nachteilig auf die thermische Ankopplung des STM aus, sind aber für einen reproduzierbaren Bewegungsablauf unerlässlich. Durch die bogenförmige Anordnung der Bänder kann so zum Beispiel sichergestellt werden, dass die Litzen im Betrieb nicht mit anderen Komponenten, insbesondere dem unteren Gegenkonus und den Kanten des Magneten, kollidieren. Um den thermischen Eintrag durch die Aufhängungen so gering wie möglich zu halten, ist die Verbindung zwischen Kupferband und Aufhängung durch Teflon[®]-Verbindungen entkoppelt.

Die Temperaturen der einzelnen Komponenten in den jeweiligen Positionen des STM sind ebenfalls in Abbildung 3.3 dargestellt. Bei den in der Temperaturskala ohne Stern geschriebenen Werten handelt es sich um Messwerte zweier Cernox[®] Temperatursensoren, bei den mit Stern versehenen Werten um Abschätzungen. In der Messposition ist der thermische Eintrag des STM auf die Ankopplung der Kupferlitzen und auf die Federaufhängung beschränkt. Ein weiterer thermischer Eintrag erfolgt durch die im folgenden Kapitel diskutierte Dämpfungspads. Dieser Eintrag sollte aber durch das verwendete Material vernachlässigbar gering sein. Wie die erzielte Endtemperatur des STM von 1.5K nahelegt, richtet sich die STM Temperatur mit einer Abweichung von nur ca. 0.3 Kelvin weitgehend nach der erzielbaren Temperatur im 1K-Pot.

Im Gegensatz zur Messposition existieren in der Austauschposition mehrere Quellen thermischen Eintrags. Obwohl die erzielbare Endtemperatur des STM in dieser Position auf knapp unter 4K beschränkt ist, bietet dieser zusätzliche thermische Eintrag auch entscheidende Vorteile: So wird durch die zusätzliche Ankopplung an den Heliumtank einerseits die Zeit, die das STM nach einem Probenwechsel benötigt um wieder auf seine Basistemperatur zu kommen, wie auch die Zeit, um das STM und den 1K-Pot nach Wartungsarbeiten auf LHe-Temperatur zu kühlen, signifikant verringert.

3.4 Schwingungsdämpfung

Wie im theoretischen Teil beschrieben, ist das Hauptmerkmal, welches die Technik der STM gegenüber anderen Messmethoden auszeichnet, ihr hohes örtliche Auflösungsvermögen im Pikometer-Bereich. Das volle Auflösungsvermögen lässt sich jedoch nur ganz ausnutzen, wenn die mechanische Stabilität des Tunnelkontakts (Spitze-Probe-Abstand) so hoch ist, dass externe Störquellen keinen maßgeblichen Einfluss auf die Messung haben. Das bedeutet ebenfalls, dass die Transmission von Bodenschwingungen oder Vibrationen, die zum Beispiel durch verdampfende Kryoflüssigkeiten entstehen können, auf das STM effektiv gedämpft werden muss. Dies kann zum Beispiel durch Federsysteme, Luftfedersystem oder Elasto-

3.4 Schwingungsdämpfung

mersysteme, verbunden mit einem stabilen STM-Aufbau erreicht werden [35]. Die Arbeitsweise dieser Systeme lässt sich hierbei auf ein einfaches mechanisches System aus einer Masse (hier der STM-Körper) und einer Feder zurückführen. Wird ein solches System mit einer externen Schwingung angeregt, so lässt sich die Amplitude der Bewegung des STM-Körpers in Abhängigkeit der Anregungsfrequenz ω durch die Transferfunktion beschreiben [35]:

$$K(\omega) = \sqrt{\frac{\omega_0^4 + 4\gamma^2\omega^2}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + 4\gamma^2\omega^2}}. \quad (3.1)$$

Hierbei entspricht ω_0 der Resonanzfrequenz des Federsystems und γ der Dämpfungskonstanten. Wie direkt ersichtlich hängt die Transmission externer Schwingungen von $(\omega_0^2 - \omega^2)$ der Differenz zwischen Anregungsfrequenz und Eigenfrequenz des Federsystems ab. Je geringer also die Eigenfrequenz des Federsystems ist, desto geringer ist die Transmission hochfrequenter externer Störungen auf das STM. Um gleichzeitig niedrige Störfrequenzen aus dem Anregungsspektrum zu filtern, muss der STM-Aufbau eine möglichst hohe Eigenfrequenz besitzen. Dies lässt sich im selben Modell erklären, wenn der Abstand zwischen Spitze und Probe mit der Ausdehnung der Feder gleichgesetzt wird. Daraus ergibt sich für die Transferfunktion auf den Abstand zwischen Spitze und Probe folgende Gleichung [36]:

$$K(\omega) = \sqrt{\frac{\omega^4}{((\omega_0')^2 - \omega^2)^2 + 4(\gamma')^2\omega^2}}. \quad (3.2)$$

Daraus ergibt sich wiederum, dass die Dämpfung der Störung mit der Differenz zwischen Anregungsfrequenz und Eigenfrequenz skaliert, hier tritt im Gegensatz zu Gleichung 3.1 jedoch eine Dämpfung für niedrige Anregungsfrequenz auf. Kombiniert lassen sich somit Störungen im vollen Frequenzspektrum dämpfen.

Das Dämpfungssystem im 1K-System besteht, wie in Abbildung 3.4 dargestellt, aus bis zu zwei separaten Stufen. Die erste Stufe bilden drei pneumatische Vibrationsdämpfungsfüße der Firma Newport[®], welche jeweils auf mit Sand gefüllten Säulen hoher Masse verbaut sind. Die Aufhängung der ersten Dämpfungsstufe wurde dabei oberhalb des Schwerpunkts des Kryostaten gewählt, damit die Gleichgewichtsposition ein stabiles Minimum bezüglich der Gravitation bildet. Die Position des Kryostaten wurde hierbei in den Schwerpunkt der Aufhängungspunkte gesetzt, um die Belastung gleichmäßig auf alle Dämpfungsfüße zu verteilen. Die Säulen sind zusätzlich durch Elastomerfüße vom Laborboden getrennt, was streng genommen ein weiteres Dämpfungssystem darstellt. Aufgabe der ersten Dämpfungsstufe ist es die Transmission mechanischer Schwingungen des Gebäudes sowie des Bodens auf den Kryostaten zu dämpfen.

Die zweite Stufe des Dämpfungssystems bildet ein Federsystem, das jedoch nur in

3 Design und Aufbau des 1K-STM

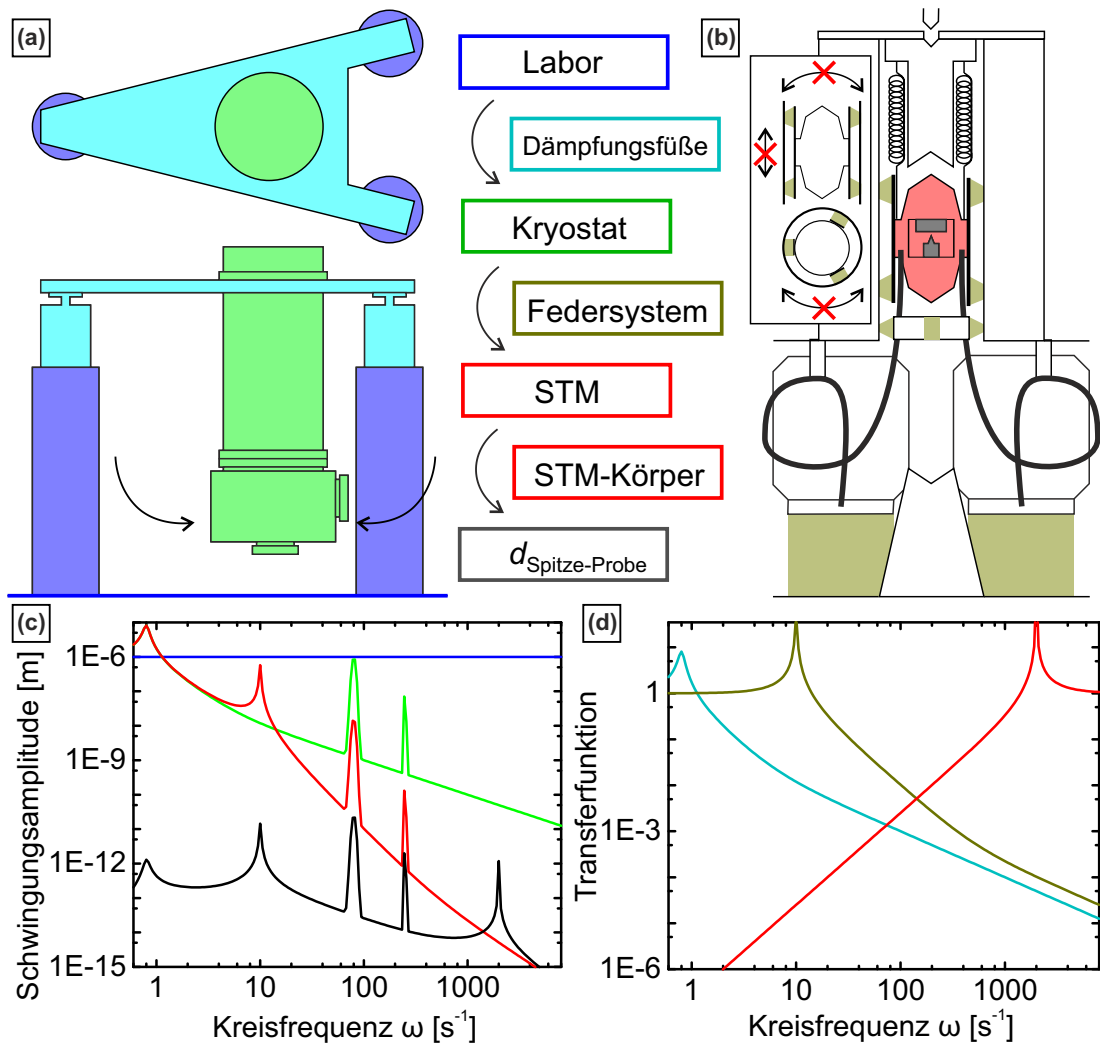


Abbildung 3.4: Schematische Darstellung des Schwingungs-Dämpfungssystems. (a) Aufhängung des Kryostaten und Position der pneumatischen DämpfungsfüÙe. (b) Dämpfung des Federsystems der STM-Aufhängung im Kryostaten. Wie der Inset zeigt sind dabei alle Bewegungsfreiheitsgrade berücksichtigt. Zur Vermeidung von Schwingungen im 1K-Pot ist dieser mit Schaumstoff am LHe-Schild befestigt. (c) Amplitude von Bodenschwingungen (blau) sowie Schwingungen induziert durch verdampfende Kryoflüßigkeiten in den einzelnen Abschnitten des Dämpfungssystems. Dabei wurde ein kontinuierliches Rauschspektrum für Bodenschwingungen und Gauss-förmige Resonanzen für verdampfende Kryoflüßigkeiten angenommen. (d) Transferfunktionen der einzelnen Schwindungsdämpfungssysteme. Die angenommenen Resonanzfrequenzen sind dabei 1 Hz für die DämpfungsfüÙe (hellblau), 10 Hz für das Federsystem (oliv) und 2000 Hz für die Eigenfrequenz des STM-Körpers (rot).

der Messposition aktiv ist. Die Kupfer-Beryllium Federn des Federsystems sind dabei so angepasst, dass das STM unter Last knapp unterhalb des oberen Gegenkonus frei hängt. Die Schwierigkeit hierbei bildet die Dämpfung des Federsystems. Obwohl sich Dämpfung nach Gleichung 3.1 negativ auf die Transferfunktion auswirkt, ist ein gewisses Maß an Dämpfung unerlässlich. Dies wird üblicherweise durch eine Wirbelstromdämpfung erzielt. Aufgrund der Tatsache, dass die Messposition innerhalb des supraleitenden Magneten liegt, ist eine Wirbelstromdämpfung basierend auf Permanentmagneten (vgl. [35]) jedoch unmöglich. Ebenfalls gestaltet sich eine Wirbelstromdämpfung unter Zuhilfenahme des supraleitenden Magneten als schwierig, da in diesem Fall magnetisch sensitive Probensysteme wie Typ I Supraleiter nicht gemessen werden können.

Die Dämpfung des Federsystems besteht aus diesem Grund aus 6 Reibungspads, wie in Abbildung 3.4(b) dargestellt. Die einzelnen Pads bestehen hierbei aus SOLIMIDE[®] Foam, einem Schaumstoff, der selbst bei Temperaturen unter 4 K elastisch ist und eine sehr schlechte thermische Leitfähigkeit besitzt.⁴ Während die Elastizität wichtig für die Dämpfungseigenschaften ist, ist der schlechte thermische Leitwert essentiell, um bei Messungen unter 4.2 K keinen zusätzlichen thermischen Eintrag auf das STM über die Reibungspads zu bekommen. Die Anordnung der Pads wurde hierbei so gewählt, dass alle Bewegungsformen (Translation, Rotation und Nickbewegungen) hinreichend unterdrückt werden (vgl. Inset von Abbildung 3.4(b)).

Die Entwicklung der Schwingungsamplituden über die einzelnen Dämpfungssysteme ist in Abbildung 3.4(c) veranschaulicht. Dabei wurde angenommen, dass frequenzunabhängige Bodenschwingungen im Mikrometerbereich auf den Kryostaten einwirken, und die Vibrationen durch das Verdampfen von Flüssigstickstoff bzw. flüssigem Helium gaußförmige Resonanzen ebenfalls im Mikrometerbereich bilden. Die Resonanzfrequenz sowie der Dämpfungsparameter der Luftdämpfungsfüße wurde sinngemäß aus dem Datenblatt der Dämpfungsfüße übernommen [37], während die entsprechenden Parameter für das Federsystem und das Rastertunnelmikroskop Abschätzungen basierend auf indirekten Messungen und FEM-Simulationen bilden. Ein Vergleich der Kurven vor und nach der zweiten Dämpfungsstufe zeigt, dass durch das Federsystem zwar einerseits die Amplitude von Störungen mit hohen Frequenzen zusätzlich gedämpft wird, andererseits aber auch Störungen im Bereich der Resonanzfrequenz des Federsystems verstärkt werden. Dieser Effekt kann jedoch durch eine genaue Justierung der Kompression der Reibungspads, und damit verbunden des Dämpfungsparameters γ , abgemildert werden.

⁴Herzlichen Dank hierbei an Dr. Daniel Wegner für die Idee das Material SOLIMIDE[®] für die Dämpfung einzusetzen.

3.5 STM-Körper

Im folgenden Abschnitt soll der Aufbau des von mir konstruierten STM-Körpers innerhalb des 1K-Systems vorgestellt werden. Hauptaugenmerk liegt dabei einerseits auf den physikalischen Eigenschaften der verwendeten Materialien sowie dem geometrischen Aufbau des STM-Körpers. In beiden Fällen muss der STM-Körper dabei hinsichtlich der folgenden Kriterien optimiert werden.

Wie im letzten Kapitel erklärt, hängt die Transmission von Schwingungen auf den Spitze-Probe-Abstand mitunter von der Resonanzfrequenz des STM-Körpers ab. Aus diesem Grund gilt die einfache Relation, je stabiler der STM-Körper, desto besser die Performance.

Durch die Möglichkeit, mithilfe des 1K-Pots die Probertemperatur unter 4.2 K zu senken, sollte der STM-Körper weiterhin eine gute thermische Leitfähigkeit in diesem Temperaturbereich besitzen. Dies ist essentiell, um die Zeit zum Erreichen des thermischen Gleichgewichts zwischen Probe und STM bei vorgegebener Temperatur möglichst gering zu halten, da ein thermisches Ungleichgewicht zu Driftbewegungen des Scanners führt [12].

3.5.1 Material

Material	Dichte [$\frac{\text{g}}{\text{cm}^3}$]	Elastizitätsmodul [GPa]	Th. Leitfähigkeit [$\frac{\text{W}}{\text{mK}} _{4\text{K}}$]
BeCu	8.25 ⁴	125 ⁴	2 ¹
PCu	8.78 ⁴	110 ⁴	7.5 ¹
AgCu	10.28 ³	124 ⁵	11.8 ³
MACOR	2.5 ²	67 ²	0.08 ⁶
Saphir	3.98 ²	335 ²	110 ¹
Cu	8.932 ¹	168 ¹	162 ¹
Ag	10.50 ¹	124 ¹	147 ¹

Tabelle 3.1: Physikalisch relevante Eigenschaften innerhalb von STM-Aufbauten verwendeter Materialien. Dichte, Elastizitätsmodul und thermische Leitfähigkeit bei 4 Kelvin für ausgewählte Materialien. Die Quellen der Daten setzen sich dabei folgendermaßen zusammen: ¹ [29], ² [38], ³ [39], ⁴ [40], ⁵ Abschätzung auf Basis von Reinsilber, ⁶ [41]

Es existiert eine große Vielfalt an Materialien, die für den Bau von STM-Körpern verwendet wurden. Dabei reicht die Spanne von keramischen Materialien wie MACOR[®] [42] oder Saphir [38] über Kupfer- und Silberverbindungen [43–46] bis hin zu reinen Metallen wie Titan [47] oder Molybdän [48], wobei jedes Material spezifische Vor- und Nachteile für die Verwendung innerhalb eines STM besitzt. Die Auswahl der vorgestellten Materialien beschränkt sich hierbei auf Stoffe, die diamagnetisch sind und deren supraleitende Sprungtemperatur unter 1 K

liegt. Diese Voraussetzungen sind notwendig, da andernfalls Streufelder innerhalb der Materialien das Feld an der Probe oder Referenzmessungen im Nullfeld beeinflussen würden. Eine Liste der relevanten physikalischen Eigenschaften dieser eingeschränkten Materialauswahl ist in Tabelle 3.1 aufgelistet. Von Interesse sind hierbei diejenigen Einflussfaktoren, die die Stabilität und das Temperaturverhalten prägen.

Um die Stabilität eines Materials zu bestimmen, können weitgehend die Überlegungen aus Kapitel 3.4 übernommen werden. Die Resonanzfrequenz des STM-Körpers skaliert dabei in Abhängigkeit des Elastizitätsmoduls G und der Dichte ρ : $\omega_R \propto \sqrt{G/\rho}$ [38]. Bezüglich der vorgestellten Stoffe bietet hierbei Saphir mit weitem Abstand die günstigsten Eigenschaften. Die essentielle Größe für ein stabiles thermisches Gleichgewicht innerhalb eines Materials ist die thermische Leitfähigkeit. Je größer die thermische Leitfähigkeit, desto schneller bildet sich ein thermisches Gleichgewicht. Wie ebenfalls in Tabelle 3.1 zu sehen liegt die thermische Leitfähigkeit von Saphir und reinen Metallen höher als die der Verbindungen.

Trotz seiner ausgezeichneten physikalischen Eigenschaften bringt die Verwendung von Saphir als Basismaterial für den STM-Körper technische Probleme mit sich. Zwar ist es möglich, einen STM-Körper aus technischem Saphir herzustellen (vgl. [38]), jedoch muss die Bauform aufgrund der mechanischen Verarbeitung sowie der hohen Kosten von Saphir sehr primitiv gewählt werden. Durch die unterschiedlichen thermischen Ausdehnungskoeffizienten von Saphir zu Metallen ist eine kombinierte Konstruktion ebenfalls schwierig. Aufgrund der Notwendigkeit konisch geformter Enden zur Anbindung an den Kryostat sowie der Komplexität des Bauteils zur Anbindung der Kupferlitzen war es nicht möglich, Saphir als Basismaterial des STM-Körpers zu verwenden.

Ebenfalls gestaltet sich eine Konstruktion aus reinem Silber oder Kupfer als schwierig, da beide Stoffe vergleichsweise weich sind und somit die Belastbarkeit von Gewindebohrungen innerhalb des Materials beschränkt. Aufgrund dieser Einschränkungen wurden die Hauptbauteile des STM-Körpers aus Münzsilber (90% Ag, 10% Cu) hergestellt, einer Verbindung, die schon erfolgreich in mehreren STM eingesetzt wurde [44, 45]. Zum Schutz gegen Korrosion der Oberflächen wurden die Bauteile zusätzlich mit einer dünnen Goldschicht versehen. Als Einschränkung muss hierbei jedoch erwähnt werden, dass im Zuge von Nachbesserungsarbeiten am ursprünglichen STM im vorgestellten Design zwei Bauteile durch Bauteile aus OFHC-Kupfer ersetzt wurden. Da Münzsilber elektrisch leitend ist und der Aufbau eines STM ebenfalls nicht-leitfähige Materialien fordert, wurden innerhalb des STM weitere oben aufgeführte Materialien verwendet, auf die im folgenden Kapitel eingegangen werden soll.

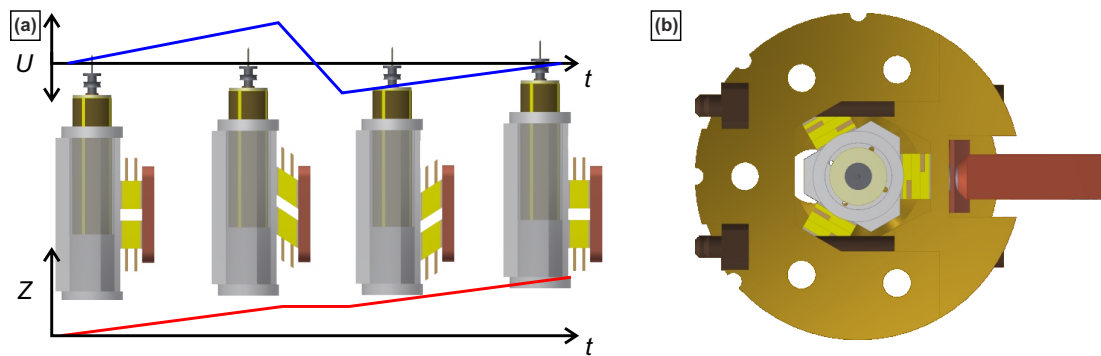


Abbildung 3.5: Schematische Darstellung der Slip-Stick-Bewegung sowie der Ankopplung im STM-Körper. (a) Diagramm der angelegten Spannung und der z -Bewegung mit Darstellung der Scanner- und Piezopositionen in den einzelnen Abschnitten. (b) Darstellung der Befestigung des Scanners innerhalb des STM-Körpers.

3.5.2 Aufbau

Der prinzipielle Aufbau der meisten modernen Rastertunnelmikroskope ist grundsätzlich ähnlich. Das grundlegende Prinzip basiert auf einem von S. H. Pan entwickelten Mechanismus unter Verwendung der sogenannten "Slip-Stick-Motion" (dt: Gleit-Haft-Bewegung) [49]. Dabei wird, wie in Abbildung 3.5 dargestellt, ein Saphir-Prisma zwischen drei um 120° gedrehten Paaren von Piezoaktuatoren eingeklemmt. Um Effekte der unterschiedlichen thermischen Ausdehnung zwischen STM-Körper und Saphir-Prisma kompensieren zu können, sind dabei nur zwei Paare fest mit dem STM-Körper verbunden, während das dritte Paar flexibel über eine elastische Blattfeder verbunden ist. Zur Bewegung des Saphir-Prismas wird eine elektrische Sägezahnspannung an die Piezoaktuatoren angelegt. Während der Phasen mit geringer Flankensteilheit der Spannung kann das Saphir-Prisma der Bewegung des Aktuators folgen und bewegt sich proportional zur Auslenkung ('stick'). Im Gegensatz dazu kann das Saphir-Prisma aufgrund seiner Masse während der schnellen Spannungsänderungen nicht folgen und der Aktuator gleitet über die Oberfläche des Saphirs zurück in seine ursprüngliche Position ('slip'). Die Positionsänderung durch einen solchen Schritt liegt üblicherweise im Bereich der Auslenkung des Piezoaktuators, also im Nanometerbereich. Durch die Wiederholung dieses Zyklus kann somit das Saphirprisma auf mehrere Nanometer genau über große Distanzen bewegt werden. Die Effizienz dieser Bewegung hängt dabei vom Andruck der Blattfeder ab, der sich mit der Temperatur ändert. Um die Bewegung des Prismas bei kalten Temperaturen im Vakuum zu optimieren, kann deshalb die Andruckstärke durch zwei mit einem Wobble-Stick drehbaren Schrauben angepasst werden [50].

Der STM-Körper selbst besteht aus mehreren Teilen, die mit eigens angefertigten Bronze-Schrauben verbunden sind (vgl. Abbildung 3.6). Da die Stabilität von

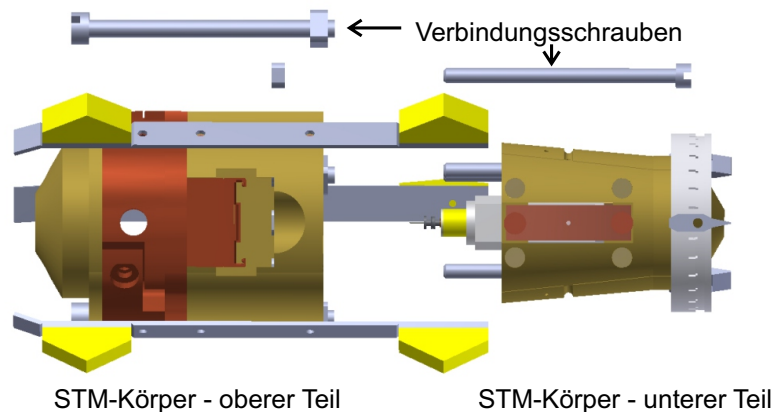


Abbildung 3.6: Explosionsansicht des STM-Körpers. Der STM-Körper besteht funktional aus zwei Teilen. Im oberen Teil befindet sich die Anbindung des Federsystems und der Kupferlitzen sowie der Probeneinschub. Der untere Teil beinhaltet die Scanner-Aufhängung sowie die elektrische Anbindung. Verbunden werden die Bauteile durch selbst angefertigte Bronzeschraubverbindungen.

Münzsilber gegen Deformationen für eine feste Schraubverbindung nicht ausreicht, wurden als Gegenstück zu den Schrauben Vierkant-Muttern aus Bronze konstruiert, die in passgenauen Vertiefungen innerhalb des STM-Körpers versenkt werden. Neben der größeren Stabilität und damit der Möglichkeit die Bauteile stärker zu verschrauben, bietet dies die Option, bei eventuellem Verschleiß der Gewinde die Schraubverbindung mit vergleichsweise geringem Aufwand wiederherzustellen.

Der untere Teil des 1K-STM (vgl. Abbildung 3.7 (b)), der die Scanner-Aufhängung beinhaltet, besteht aus drei Bauteilen, die passgenau zu einem Kegelstumpf mit abschließendem Kegel zusammengesetzt werden können. Der maximale Durchmesser, abgesehen von den Justierschrauben, beträgt hierbei 38 mm und ist somit wesentlich kleiner als die verfügbaren 63 mm Durchmesser innerhalb der supraleitenden Spule. Die modulare Bauweise begründet sich hierbei auf der maschinellen Herstellbarkeit sowie der einfacheren Montage der Piezoaktuatoren und des Scanners. Die leicht konische Bauweise geht zurück auf eine individuelle Optimierung der Resonanzfrequenz durch FEM-Simulationen mit SolidWorks®, basierend auf generellen Untersuchungen von Ast *et. al.* [51]. Der kegelförmige Abschluss des unteren STM-Körpers bildet den Anschluss an den am Heliumschild befestigten Gegenkegel und bietet damit eine mechanisch stabile Verbindung bei großer thermischer Oberfläche.

Der Aufbau wie auch die verwendeten Materialien des Scanners (vgl. Abbildung 3.7 (c)) wurden weitgehend von der Arbeit von J. Kügel [50] übernommen. Zusätzlich wurde jedoch innerhalb des Scannerröhrchens ein weiteres Kupferröhrchen verbaut, das elektrisch mit dem STM-Körper verbunden ist. Dies bewirkt eine zusätzliche Abschirmung des Tunnelstroms gegenüber den hohen elektrischen Fel-

3 Design und Aufbau des 1K-STM

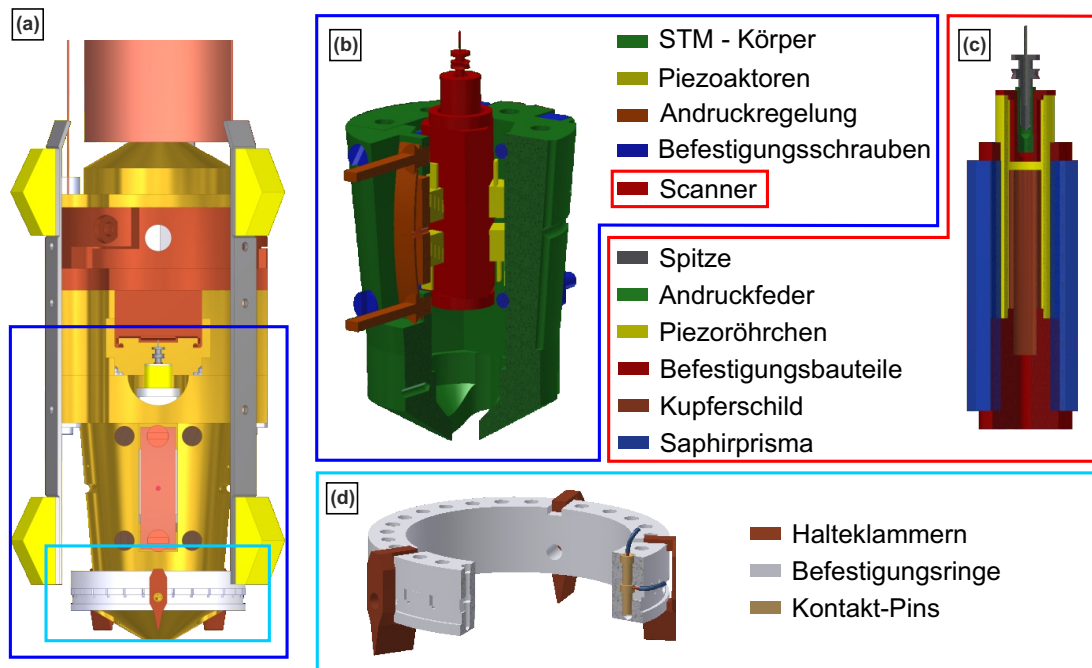


Abbildung 3.7: 3D Modell des Rastertunnelmikroskops (unterer Teil). (a) Darstellung des gesamten STM-Körpers. (b) 3/4-Schnitt durch das untere STM mit eingefärbten Komponenten (c) 3/4-Schnitt durch den Scanner mit eingefärbten Komponenten (d) Schnittstelle für elektrische Verkabelung (Pin-Station).

dern, insbesondere in den Endbereichen des Röhrenscanners. Des Weiteren stehen im Vergleich zu dem von J. Kügel vorgestellten Design die Befestigungsbauteile bezüglich der Gleitflächen des Saphirprismas leicht über. Damit soll sichergestellt werden, dass sich der Scanner nicht aus dem festgelegten Bewegungsintervall herausbewegt und sich damit die Andruckfläche zwischen Saphirprisma und den Piezoaktoren nicht ändert.

Für die Option, die elektrische Kontaktierung im Falle von Umbau- oder Wartungsmaßnahmen kurzfristig zu lösen, ist am unteren Teil des STM eine elektrische Schnittstelle verbaut (Pin-Station). Wie in Abbildung 3.7 (d) dargestellt besteht diese aus zwei Ringen aus Teflon[®], in die jeweils 25 passgenaue Vertiefungsbohrungen für IC-Stecker (Pins) eingearbeitet sind. Die gesamte elektrische Verkabelung Kryostat-seitig wird hierbei am unteren Teflonring befestigt, während die entsprechenden Kabel STM-seitig im oberen Teflonring verankert sind. Um die Wahrscheinlichkeit einer zufälligen Kontaktierung zweier Pins zu minimieren, sind die Pins dabei vollständig im Teflon eingebettet, sodass nach außen keine leitenden Oberflächen freistehen. Um ein Lösen der Kontakte durch zum Beispiel Bewegung des STM zwischen Mess- und Austauschposition auszuschließen, werden die beiden

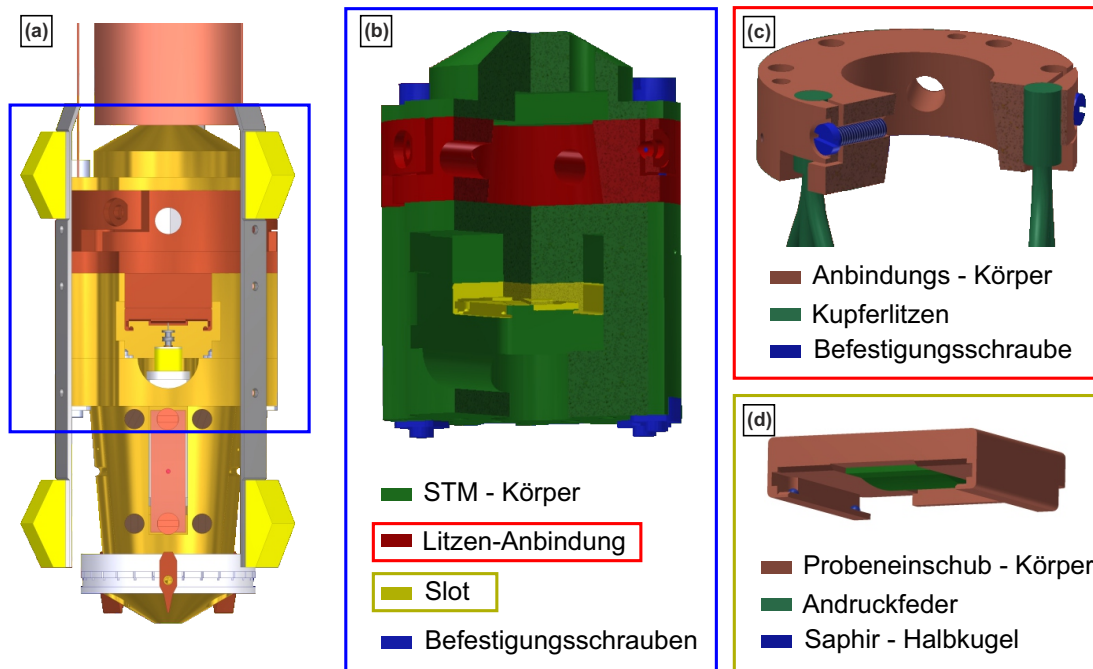


Abbildung 3.8: 3D Modell des Rastertunnelmikroskops (oberer Teil). (a) Darstellung des gesamten STM-Körpers. (b) 3/4-Schnitt durch das obere STM mit eingefärbten Komponenten (c) 3/4-Schnitt durch das Befestigungsbauteil der Kupferlitzen (d) Darstellung des Probenhalters.

Ringe durch drei Halteklammern aufeinander gepresst, an denen die Pin-Station durch Schrauben am STM-Körper befestigt wird.

Die spitz zulaufende und überstehende Form der Halteklammern erfüllt dabei eine weitere Funktion. Durch die Rotationssymmetrie des oberen und unteren Abschlusskonus lässt sich der Winkel, in dem das STM in der Austauschposition zum Fenster im Heliumschild steht, in einem gewissen Bereich frei wählen. Die Halteklammern brechen dabei genau diese Rotationssymmetrie, so dass durch den Einbau eines entsprechenden Gegenbauteils am unteren Gegenkonus dieser Winkel fixiert werden kann. Da die freie Wahl des Winkels jedoch auch Vorteile hinsichtlich des Lichteinfalls und des in situ Aufdampfens mit sich bringt, ist das entsprechende Gegenbauteil im aktuellen Aufbau nicht eingebaut.

Die Form des oberen Teils des STM-Körpers (vgl. Abbildung 3.8 (b)) basiert auf einem älteren Design mit integriertem xy -Verschiebetisch (Abbildung 3.9). Ein xy -Verschiebetisch bietet dabei prinzipiell die Möglichkeit, die Position der Spitze auf der Probe vergleichsweise makroskopisch (mehrere Millimeter) zu verschieben. Dies ist insbesondere bei Spaltproben aufgrund der oft ungleichmäßigen Spaltung hilfreich, um eine flache Probenregion zur Untersuchung zu finden. Aufgrund an-

3 Design und Aufbau des 1K-STM

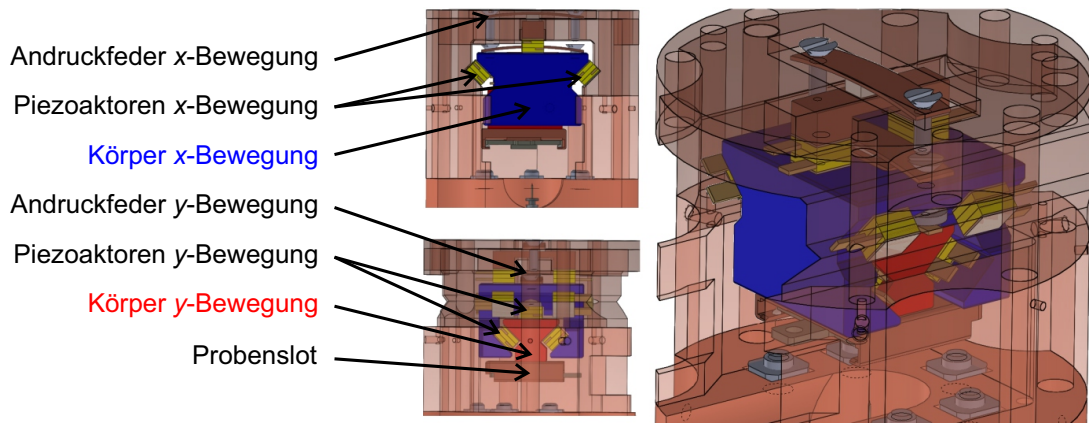


Abbildung 3.9: 3D-Modell des ehemals verbauten xy -Verschiebetischs. Die Konstruktion besteht aus zwei ineinander verschachtelten Slip-Stick-aufbauten. Die Anpresskraft kann wie im Scanner-Aufbau durch Andruckfedern eingestellt werden.

haltender Probleme mit niederfrequenten Störungen in der z -Stabilität wurde der xy -Verschiebetisch jedoch im weiteren Verlauf meiner Experimente durch eine stabilere Variante ohne horizontale Bewegungsmöglichkeit ausgetauscht.

Die Ankopplung der Kupferlitzen an den STM-Körper erfolgt über das in Abbildung 3.8 (c) dargestellte Bauteil. Die in Zylindern kaltverpressten Litzen werden dabei über einen schraubbaren Klemm-Mechanismus mit dem STM-Körper verbunden. Dies bietet den Vorteil, dass neben der großen Andruckoberfläche keine Zwischenschichten aus anderen Materialien entstehen, welche die thermische Leitfähigkeit zwischen Kupferlitze und STM-Körper negativ beeinflussen. Des Weiteren bietet der Schraubmechanismus eine einfach zu lösende Verbindung bei gleichzeitig hoher Anpresskraft.

Die Probenhalterung (vgl. Abbildung 3.8 (d)) folgt weitgehend einem standardisierten Aufbau angepasst auf Probenplättchen nach Abmessungen, wie sie in Omicron[®]-Systemen verwendet werden [50, 52]. Im Gegensatz zu den genannten Referenzen erfolgt die stabile Arretierung des Probenplättchens dabei aber nicht über seitlich angebrachte Federdrähte, sondern über eine breite zentrale Andruckfeder aus Kupfer-Beryllium, um den thermischen Fluss auf die Probe zu erhöhen. Des Weiteren sind an der Unterseite des Probeneinschubs drei Saphirhalbkugeln montiert. Die Stabilisierung der Probe erfolgt somit immer über drei Punkte und damit einer stabilen Ebene. Dies hat den Vorteil, dass durch eventuelle Unebenheiten im Material keine zusätzlichen Schwingungsfreiheitsgrade in der Probenaufhängung entstehen. Die Verwendung standardisierter Probenplättchen bietet die Möglichkeit Proben innerhalb verschiedener STM-Systeme der Arbeitsgruppe auszutauschen, was die Probenpräparation mitunter maßgeblich vereinfacht.

3.6 Präperations-System

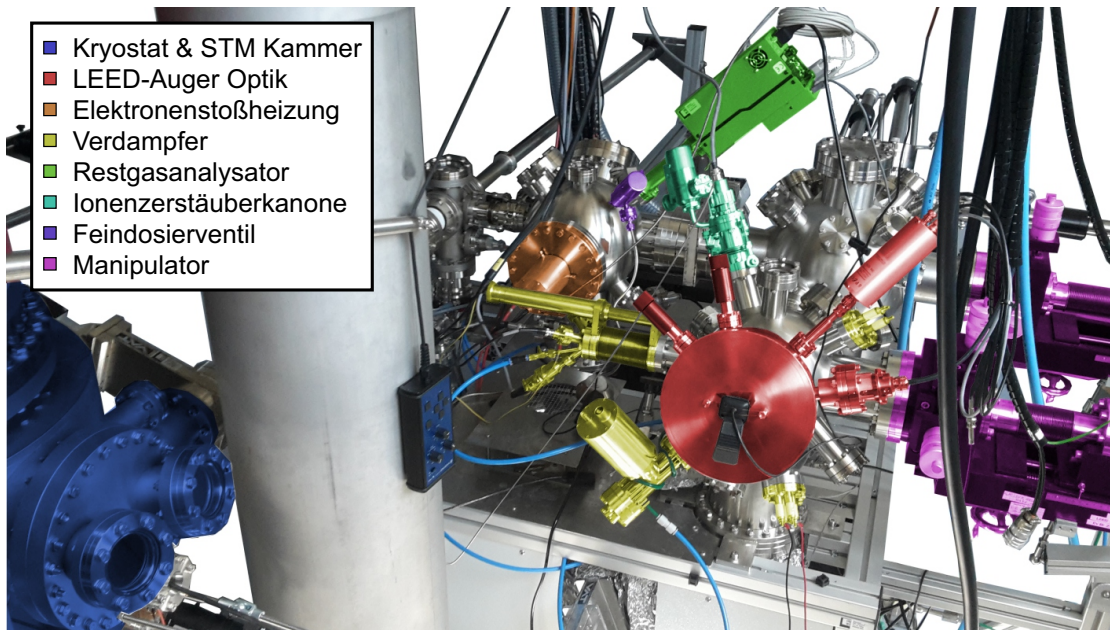


Abbildung 3.10: Foto des gesamten UHV-Proben-Präperations-Systems. Übersicht über die drei zentralen Vakuumkantern sowie die STM-Kammer. Wichtige Komponenten für die Proben-Präparation sind unterschiedlich eingefärbt und in der Legende beschriftet. Der Hintergrund wurde aus Gründen der Übersicht entfernt.

Abbildung 3.10 zeigt eine Übersicht des an das 1K-System angeschlossene Proben-Präperations-Systems. Das Kammer-Design basiert dabei auf einem Vorführsystem für Oberflächenanalyse der Firma SPECS® [53], wobei die Verwendung der einzelnen Kammern bezüglich der ursprünglichen Konzeption zweckentfremdet wurde. Der Aufbau besteht aus drei separaten UHV-Kammern, einer Kammer zum Einschleusen von Proben und einer Transferkammer zur Probenübergabe an die STM-Kammer. Zusammengenommen beinhalten sie alle zur Probenpräparation notwendigen Utensilien, die sich je nach Art der Präparation auf die einzelnen Kammern verteilen. Eine Kammer, die "Präperations-Kammer", beherbergt dabei alle Komponenten die zum Aufdampfen von Einzelatomen und dünnen Schichten notwendig sind. Dies sind insbesondere Evaporatoren für Materialien mit niedrigem und hohem Schmelzpunkt sowie einen Manipulator mit selbst entworfenem Heizmechanismus für Probertemperaturen bis ungefähr 1200° Celsius. Darüber hinaus können hier durch eine Ionen-Zerstäuber-Kanone Probenoberflächen gesputtert werden, eine Methode, die zum Beispiel zur Oberflächenbearbeitung von Edelmetalloberflächen angewandt wird. Mit Hilfe einer LEED-Auger-Optik (low energy electron diffraction = Nieder-Energie-Elektronen-Beugung) können zusätz-

3 Design und Aufbau des 1K-STM

lich Vorabaussagen bezüglich Symmetrie und chemischer Zusammensetzung der Oberflächen getroffen werden, was insbesondere beim Verdampfen von Metallen auf Edelmetalloberflächen die Zeit zur Bestimmung der richtigen Einstellungen maßgeblich verkürzt. Eine weitere Kammer beinhaltet Komponenten zur Bearbeitung von Materialien mit sehr hohem Schmelzpunkt. Dies sind insbesondere eine selbstgebaute Elektronenstoßheizung für Probertemperaturen bis 2200° Celsius sowie ein Feindosierventil für die Sauerstoffbehandlung von zum Beispiel Hartmetallen.

Um das Übersprechen mechanischer Schwingungen auf das STM zu reduzieren ist das Präparations-System durch einen flexiblen Wellbalg vom Kryostat entkoppelt. Dieser bietet, zusammen mit Absperrschiebern, ebenfalls die Möglichkeit beide Systeme für extrem störanfällige Messungen vollständig zu trennen. Für die elektrische Entkopplung beider Systeme ist zusätzlich eine keramische Sperre in die Verbindungslinie integriert.

4 Charakterisierung anhand verschiedener Probensysteme

Nachdem im letzten Kapitel der Aufbau des 1K-Systems dargestellt wurde, soll hier die Leistungsfähigkeit des Systems anhand Messungen auf verschiedenen Probensystemen vorgestellt werden. Die Messungen zur mechanischen Stabilität wurden hierbei auf BiAg_2 durchgeführt, da dieses Probensystem wohlgeordnete Phasen mit im Vergleich zu Edelmetalloberflächen hoher Korrugation besitzt. Des Weiteren waren die Schritte zur Präparation einer sauberen Oberfläche des Probensystems innerhalb der Arbeitsgruppe aufgrund bisheriger Messungen bekannt (vgl. [23]). Für eine Charakterisierung des elektronischen Auflösungsvermögens wird hingegen ein Probensystem benötigt, das elektronische Eigenschaften zeigt, die neben der diskutierten energetischen Verbreiterung durch Temperatur und der elektrischen Modulation keine natürliche Verbreiterung, wie zum Beispiel durch endliche Lebensdauer oder Streuung, aufweist. In diesem Fall bieten sich supraleitende Materialien an, da die Flankensteilheit der Ränder der supraleitenden Energiebandlücke direkt Rückschlüsse auf das energetische Auflösungsvermögen erlaubt [38]. Des Weiteren lässt sich über das Magnetfeld-abhängige Verhalten von Typ II Supraleitern eine Eichung des anliegenden Magnetfeldes durchführen [54].

4.1 Mechanische Stabilität (BiAg_2)

Die Einordnung der mechanischen Stabilität wurde anhand topographischer Messungen auf BiAg_2 vorgenommen (vgl. Abbildungen 4.1(a,b)). Das Probensystem BiAg_2 beschreibt dabei die Oberflächenrekonstruktion einer $1/3$ Monolage Bismut (Bi) auf einer $\text{Ag}(111)$ Oberfläche. Die genaue Anordnung der Bi-Atome ist, wie in Abbildung 4.1(c) zu sehen, ein zweidimensionales hexagonales Bravais-Gitter mit jeweils einem Bi- und zwei Ag-Atomen pro Einheitszelle. Da die Bi-Atome hierbei genau die Plätze der Ag-Atome der $\text{Ag}(111)$ -Oberfläche einnehmen, lässt sich die Gitterkonstante dieses hexagonalen Gitters in Abhängigkeit der Gitterkonstante der $\text{Ag}(111)$ -Oberfläche a beschreiben. Der Abstand zweier Bi-Atome ergibt sich somit zu $\sqrt{3}a$ und die Translationsvektoren des so entstandenen Gitters sind um 30° gegen diejenigen einer reinen $\text{Ag}(111)$ -Oberfläche verdreht. Aus diesem Grund wird die Rekonstruktion auch $(\sqrt{3} \times \sqrt{3}) \text{Bi}/\text{Ag}(111) R30^\circ$ genannt. Da für ei-

4 Charakterisierung anhand verschiedener Probensysteme

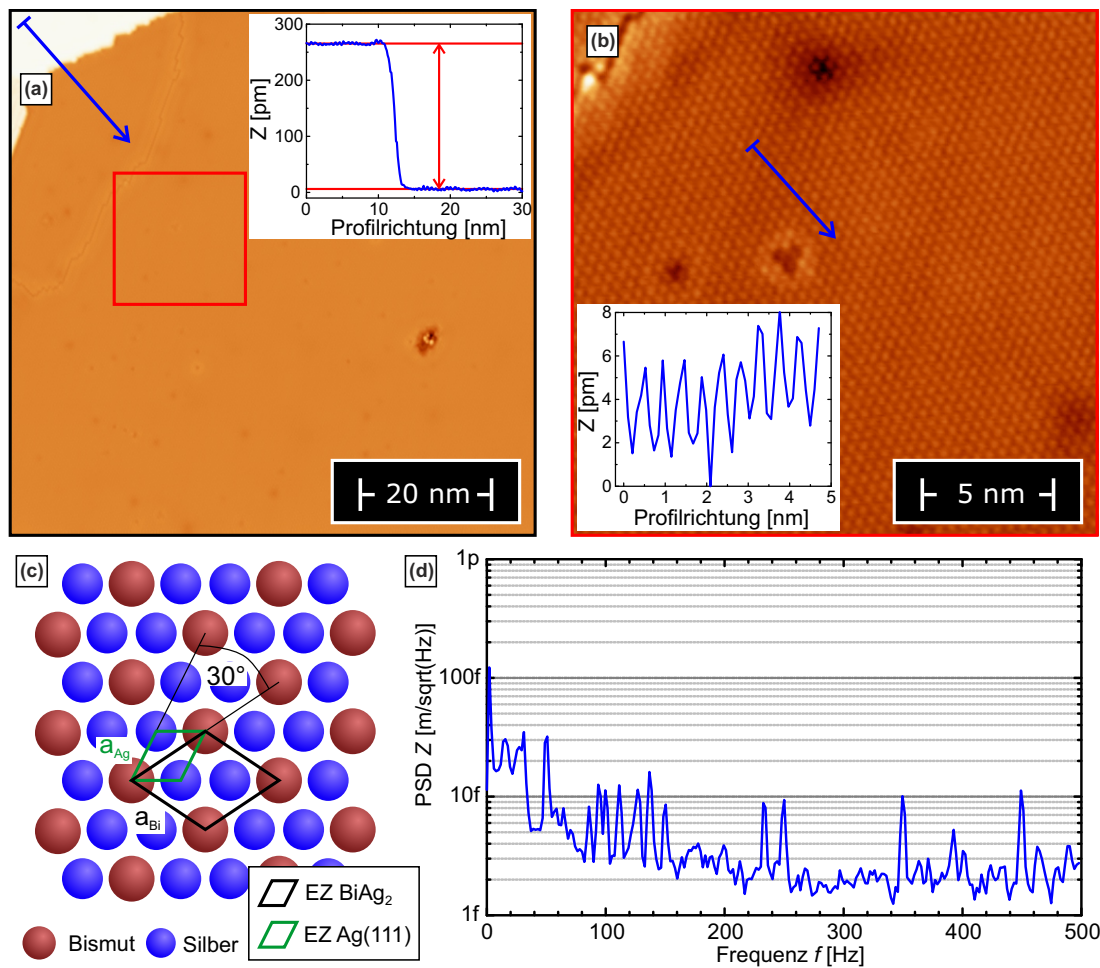


Abbildung 4.1: Messung der mechanischen Stabilität auf BiAg₂. (a) Topographieaufnahme (80×80) nm² einer BiAg₂ Oberfläche bei $U_B = 400$ mV, $I_{SP} = 100$ pA mit Linienprofil über eine Stufenkante. (b) Vergrößerter Bereich (20×20) nm² aus (a) mit Linienprofil der atomaren Korugation. (c) Struktur von BiAg₂ mit eingezeichneter Elementarzelle. (d) Spektrale Leistungsdichte der z -Stabilität des Scanners bei einer Punktmessung mit den im Text aufgelisteten Einstellungen.

ne Analyse der z -Stabilität des Rastertunnelmikroskops nur die topographische Struktur des Substrats von Interesse ist, wird hier auf eine ausführliche Beschreibung der physikalischen Eigenschaften dieses Probensystems, die beispielsweise in der Dissertation von L. El-Kareh ausführlich behandelt werden [23], verzichtet. Abbildung 4.1(a) zeigt eine Topographieaufnahme von BiAg₂, aufgenommen bei 4.3 K und ohne externes Magnetfeld. Bei der Erhöhung im linken oberen Bildrand handelt es sich um eine monoatomare Stufenkante, wie im Linienprofil im Inset dargestellt. Die Höhe der gemessenen Stufenkante beträgt dabei ≈ 0.26 nm, was näherungsweise mit den von Zhang *et. al.* [55] auf kleinen Inseln gemessenen 0.25 nm

übereinstimmt. Innerhalb des vergrößerten Bildbereichs von Abbildung 4.1(b) erkennt man zusätzlich Phasengrenzen, lokale Defekte und die atomare Korrugation einzelner Bi-Atome. Wie im Linienprofil zu sehen beträgt die Korrugation dabei ≈ 4 pm, bei einem Abstand von $a_{\text{Bi}} \approx 0.5$ nm zwischen zwei Bi-Atomen. Basierend auf der Gitterkonstanten von Silber $a_{\text{Ag}} = 0.408$ nm [29] stimmt der gemessene Abstand dabei genau mit der aufgrund der Rekonstruktion erwarteten Entfernung von $a_{\text{Bi}} = \sqrt{3} \cdot \sqrt{2}/2 = 0.4997$ nm überein (vgl. Abb. 4.1(c)). Eine qualitative Analyse der mechanischen Stabilität des Mikroskops hinsichtlich der Topographie lässt die Abschätzung zu, dass das Rauschniveau während der Messung unter 1 pm liegt.

Eine genauere Abschätzung lässt sich auf Basis des in Abbildung 4.1(d) dargestellten PSD-Spektrums (power spectral density = spektrale Leistungsdichte) einer Punktmessung ableiten. Die spektrale Leistungsdichte entspricht dabei einer diskreten Fouriertransformation der (normalerweise elektrischen) Leistung des Signals innerhalb einer definierten Bandbreite B_{eff} und wird in der Einheit $X/\sqrt{\text{Hz}}$ angegeben, wobei X der gemessenen Größe entspricht [56]. Da die Integration über alle Frequenzen wieder der Leistung entsprechen muss, kann ein effektiver Mittelwert gebildet werden:

$$z_{\text{eff}} = \sqrt{\frac{1}{f_{\text{max}}} \int_0^{f_{\text{max}}} Z(f)^2 df}. \quad (4.1)$$

Bezüglich der in Abbildung 4.1(d) dargestellten Kurve ergibt sich dadurch ein effektives z -Rauschen von $z_{\text{eff}} \approx 100$ fm.⁵ Da das z -Rauschen im wesentlichen der Reaktion des PI-Controllers auf Änderungen im Tunnelstrom entspricht, ist eine vergleichbare Analyse der mechanischen Stabilität des Rastertunnelmikroskops nur unter Angabe der relevanten Einstellungen für den PI-Controller möglich. Aus diesem Grund sind die für die in Abbildung 4.1(d) dargestellte Messung getroffenen Einstellungen im Folgenden tabellarisch aufgelistet:

P-Gain	I-Gain	I _{SP}	B _{eff}	Sampling period	Averaging
10 pm	500 μs	500 pA	1.95 Hz	1 ms	10

Bei den hier genannten Ergebnissen ist einschränkend zu bemerken, dass es sich um eine bezüglich der z -Stabilität besten Messungen handelt. Im Langzeitmittel unter Voraussetzung korrekt eingestellter DämpfungsfüÙe, einer stabil eingesetzten Spitze und gut fixierten Proben erlaubt die Stabilität des Systems jedoch immer noch stabile Messungen mit einem Signal-Rauschverhältnis, das ein Auflösungsvermögen im niedrigen pm-Bereich zulässt.

⁵Um die Rauschleistung von der Signalleistung zu trennen, wurde bei der Messung des Spektrums der Einfluss des z -Offset des Scanners durch das Scan-Steuerungsprogramm Nanonis[®] automatisch entfernt.

4.2 Elektronisches Auflösungsvermögen und Messungen im Magnetfeld (NbSe_2)

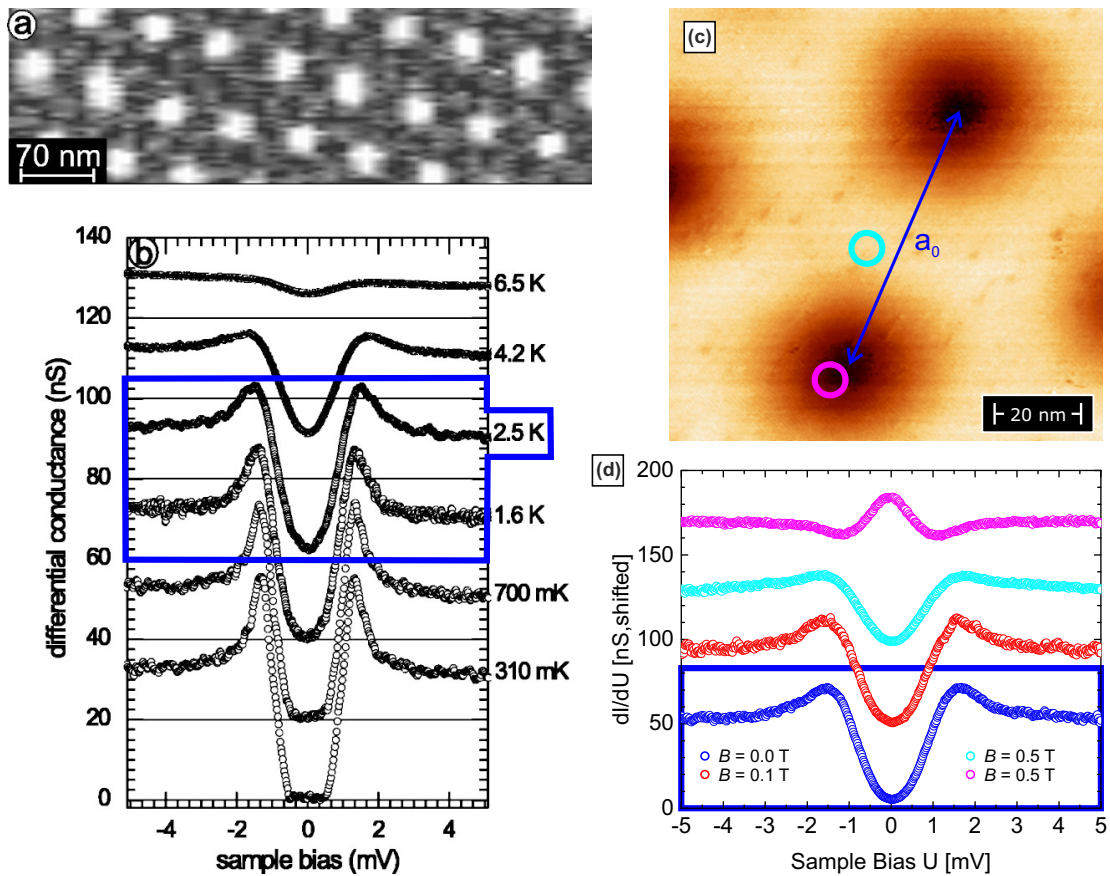


Abbildung 4.2: Messung des elektronischen Auflösungsvermögens und Magnetfeldwirkung auf NbSe_2 . (a),(b) Zustandsdichtekarte bei $U_B = 0$ mV sowie Spektroskopie der supraleitenden Bandlücke bei unterschiedlichen Proben Temperaturen (Messungen von Wiebe *et al.* entnommen aus [43]) (c),(d) Zustandsdichtekarte bei $U_B = 1.5$ mV sowie Spektroskopiekurven in unterschiedlichen externen Magnetfeldern sowie an den in (c) angegebenen Positionen bei $T_S = 1.45$ K. Die Messung ohne externes Feld ist dabei vergleichbar mit der Messung bei 2.5 K von Wiebe *et al.*

Das Probensystem Niobdiselenid NbSe_2 ist ein geschichtetes Kristallsystem, das unterhalb von 7.2 K supraleitend wird [54]. Hinsichtlich der supraleitenden Eigenschaften zählt NbSe_2 zu den Typ-II Supraleitern, hat also unter anderem ein vergleichsweise hohes kritisches Feld von $B_c = 3.2$ T senkrecht zur Probenoberfläche. Der Vorteil von NbSe_2 gegenüber vielen anderen Typ-II Supraleitern für STM-Messungen ist, dass durch die geschichtete Struktur die Probenpräparation zur Erzielung einer hinreichend glatten Oberfläche vergleichsweise einfach ist.

4.2 Elektronisches Auflösungsvermögen und Messungen im Magnetfeld (NbSe_2)

Eine Schicht besteht dabei jeweils aus kovalent gebundenen atomaren Lagen von Niob und Selen in der Reihenfolge Se-Nb-Se. Die Bindung der Schichten untereinander besteht aus der vergleichsweise schwachen Van-der-Waals-Bindung, die bei Kraftereinwirkung aufbricht, sodass die resultierenden Oberflächen großflächig (im Bereich μm^2) aus einer abgeschlossenen Schicht von Se-Atomen bestehen.

Für Typ-II Supraleiter ergeben sich innerhalb von STM-Messungen zwei charakteristische Eigenschaften. Zum Einen lässt sich in einer spektroskopischen Messung nahe der Fermi-Energie die supraleitende Bandlücke (BCS-Lücke) vermessen. Darüber hinaus ist unter Anlegen eines externen Magnetfelds unterhalb B_{crit} eine regelmäßige örtliche Variation dieser Bandlücke durch Flussschläuche zu beobachten, das Abrikosov- oder Flussliniengitter.

Die supraleitende Bandlücke lässt sich theoretisch durch die BCS-Zustandsdichte $\rho_{\text{BCS}}(\varepsilon)$ in Abhängigkeit der Energie ε beschreiben [43]:

$$\rho_{\text{BCS}}(\varepsilon) = \begin{cases} \frac{|\varepsilon|}{\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2}} & |\varepsilon| > \Delta \\ 0 & |\varepsilon| < \Delta \end{cases} \quad (4.2)$$

wobei 2Δ der energetischen Breite der supraleitenden Bandlücke entspricht. Die Existenz dieser Bandlücke basiert dabei auf dem Anregungsspektrum von Cooper-Paaren und der daraus resultierenden Dispersionsrelation [57]. Die Divergenz bei $\varepsilon = \pm\Delta$ lässt sich dadurch erklären, dass beim Übergang vom normalleitenden in den supraleitenden Zustand keine Zustände verloren gehen dürfen. Die fehlenden Zustände innerhalb der Bandlücke des Supraleiters werden dabei durch eine Erhöhung der Zustandsdichte an den Rändern der Bandlücke kompensiert. Da das temperaturabhängige Verhalten der BCS-Bandlücke auf NbSe_2 innerhalb von STM-Messungen vielfach nachgewiesen wurde, lässt sich die energetische Auflösung unseres STM anhand von Vergleichsmessungen mit anderen Systemen bestimmen. Eine direkte Bestimmung der Energieauflösung basierend auf der BCS-Theorie ist in NbSe_2 aufgrund des anisotropen Charakters der Bandlücke nicht möglich [43]. Abbildung 4.2(b) zeigt Spektroskopiekurven von Messungen der supraleitenden Bandlücke von Wiebe *et. al.* [43] bei verschiedenen Temperaturen. Dem gegenübergestellt sind in (d) eigene Messungen der Bandlücke bei einer Proben temperatur nach Cernox-Sensor von $T_{\text{S}} = 1.45 \text{ K}$, einer Modulationsfrequenz von $U_{\text{mod}} = 100 \mu\text{V}$ und externen magnetischen Feldern von $0.0 - 0.5 \text{ T}$. Ein Vergleich beider Messreihen zeigt, dass die von uns gemessene Kurve ohne externes Feld am ehesten der Messung bei 2.5 K entspricht. Damit ist die Energieauflösung des Systems etwas schlechter, als basierend auf der gemessenen Temperatur und Gleichung 2.10 anzunehmen wäre. Mögliche Erklärungsansätze für diese Abweichung sind eine Abweichung der Spitzen- oder Proben temperatur vom gemessenen Wert oder hochfrequente elektrische Störungen, die ebenfalls die effektive Temperatur anheben können (vgl. [21]).

4 Charakterisierung anhand verschiedener Probensysteme

Die zweite charakteristische Eigenschaft, das Abrikosov-Gitter, beruht auf der Tendenz von Supraleitern, Randströme zu bilden, die externe Magnetfelder kompensieren, wodurch das Innere des Supraleiters feldfrei bleibt. Diese Randströme können ein externes Feld jedoch nur bis zu einer gewissen Feldstärke $B_{c,1}$ kompensieren, sodass bei größeren Feldern die supraleitende Phase zusammenbricht und das Material in die normalleitende Phase zurückfällt. Der Unterschied zwischen Typ-I und Typ-II Supraleitern liegt nun darin, dass es in Typ-II Supraleitern energetisch günstiger ist innerhalb des Materials Phasengrenzen und normalleitende Bereiche zu schaffen. Jeder normalleitende Bereich kompensiert dabei genau ein magnetisches Flussquant $\Phi_0 = h/2e$ und wird deshalb auch Flusslinie genannt [58]. Aufgrund der abstoßenden Wechselwirkung benachbarter Flusslinien ist deren Anordnung meist hexagonal (Abrikosov-Gitter), da hierbei der Abstand mit $a_{\text{FL,h}} = 1.075\sqrt{\Phi_0/B}$ leicht höher als im quadratischen Gitter ($a_{\text{FL,q}} = \sqrt{\Phi_0/B}$) ist. Durch diese Quantisierung ist es möglich, das an der Probe anliegende magnetische Feld direkt anhand des Abstands zweier Flussquanten auf NbSe₂ zu bestimmen. Dazu kann entweder eine Zustandsdichtekarte innerhalb der supraleitenden Bandlücke $U_B = 0$ mV (Abbildung 4.2(a), aufgenommen von Wiebe *et. al.*) oder nahe der Divergenz $U_B = 1.5$ mV (Abbildung 4.2(c), eigene Messung, vgl. [54]) aufgenommen werden. Wie dabei zu sehen ist, unterscheiden sich hierbei die supraleitenden von den normalleitenden Bereichen deutlich voneinander. Um die Unterschiede innerhalb der Zustandsdichtekarte zusätzlich zu veranschaulichen, sind in Abbildung 4.2(d) jeweils eine Spektroskopie innerhalb eines Flussschlauches und außerhalb eines Flussschlauches bei einem Magnetfeld von 0.5 T dargestellt. Der Abstand zwischen zwei Flussschläuchen innerhalb unserer Messung beträgt dabei $a_{\text{FL,h}} \approx (66 \pm 5)$ nm was gut mit dem theoretischen Wert bei einem externen Feld von 0.5 T von $a_0 = 67$ nm übereinstimmt.⁶ Dadurch ist sichergestellt, dass das an der Probe anliegende Magnetfeld weitgehend dem vom Steuerungsnetzteil angegebenen Magnetfeld entspricht.

⁶Der Abstand der Flussschläuche in der schnellen (horizontal) bzw. langsamen (vertikal) Scanrichtung variiert im dargestellten Bild deutlich, was wahrscheinlich an thermischen Driftbewegungen des Scanners während der Messung liegt. Aus diesem Grund wurde für die Berechnung der Entfernung zweier Flussschläuche der Abstand in der schnellen Scanrichtung abgeschätzt.

5 Theoretische Grundlagen für Landau-Level Spektroskopie auf topologischen Isolatoren

5.1 Elektronen im magnetischen Feld - Teil I

Klassisch betrachtet erfahren bewegte Ladungen mit Geschwindigkeit \vec{v} und Masse m innerhalb eines Magnetfeldes eine Kraft \vec{F} senkrecht zu ihrer Bewegungsrichtung, die Lorentzkraft $\vec{F} = m(\vec{v} \times \vec{B})$. Um den Einfluss eines magnetischen Feldes auf Leitungselektronen innerhalb eines Festkörpers quantenmechanisch zu beschreiben, muss der Impuls der Elektronen durch die Kopplung an ein Vektorpotential $\vec{p} \rightarrow \vec{p} - e\vec{A}$ korrigiert werden. Im Folgenden wird dabei angenommen, dass es sich bei den Leitungselektronen um freie Elektronen mit $E = \hbar^2 k^2 / (2m)$ handelt, was den Geltungsbereich innerhalb der Brillouin-Zone des Festkörpers einschränkt. Für eine Vereinfachung der nachfolgenden Berechnung wird eine magnetische Flussdichte B in z -Richtung angenommen ($\vec{B} = B\vec{e}_z$) und das Vektorpotential \vec{A} in der Landau-Eichung beschrieben $\vec{A} = xB\vec{e}_y$.⁷ Unter zusätzlicher Berücksichtigung der Spinorientierung der Elektronen im Magnetfeld $\sigma = \sigma_z = \pm 1/2$, ergibt sich der Hamiltonoperator zu (vgl. [59, 60]):

$$\mathcal{H} = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{p_z^2}{2m} + 2\sigma\mu_B B - \frac{eB}{m} p_y x + \frac{e^2 B^2}{2m} x^2. \quad (5.1)$$

Durch die Struktur des Hamiltonoperators lässt sich dieser unter Einführung der Zyklotron- oder Larmor-Frequenz $\omega_0 = \frac{eB}{m}$ in die Form eines um x_0 verschobenen eindimensionalen Harmonischen Oszillators überführen:

$$\mathcal{H} = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_z^2}{2m} + 2\sigma\mu_B B + \frac{m}{2}\omega_0^2 \left(x - \underbrace{\frac{p_y}{m\omega_0}}_{=x_0} \right)^2. \quad (5.2)$$

Durch die Analogie zum Harmonischen Oszillator ergibt sich eine Quantisierung

⁷Im Folgenden wird im Text zur Vereinfachung die magnetische Flussdichte B als Magnetfeld bezeichnet.

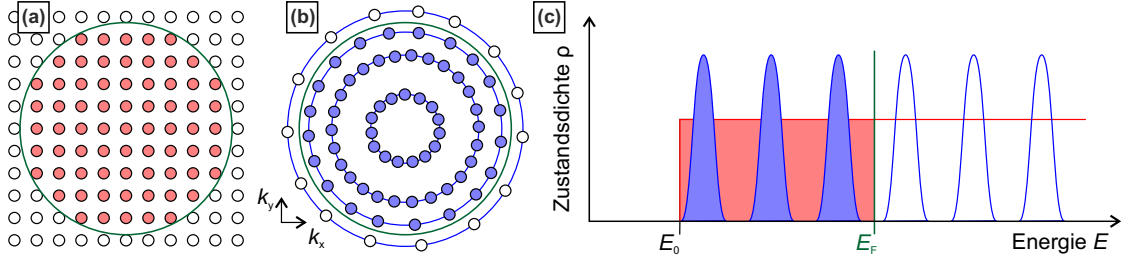


Abbildung 5.1: Schematische Darstellung der Zustandsdichte eines 2D-Elektronengases im magnetischen Feld. (a) Zustandsdichte $\rho(\vec{k})$ ohne externes Feld. Alle Zustände sind isotrop in k_x und k_y quantisiert und bis zu E_F besetzt. (b) Zustandsdichte $\rho(\vec{k})$ im starken Magnetfeld. Die Zustände kondensieren auf Landau-Kreisen mit $|k| = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$. (c) Vergleich der Zustandsdichte $\rho(E)$ mit und ohne starkem magnetischem Feld (nach [59]).

der Energieeigenwerte:

$$E_{n,k_z,\sigma} = \hbar\omega_0 \left(n + \frac{1}{2} + \sigma \right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \quad n \in \mathbb{N}_0, \quad (5.3)$$

wobei der Zustand zum Energieeigenwert E_n als Landau-Level (LL) der Landau-Quantenzahl n bezeichnet wird. Je nach Spinorientierung des Zustands ergibt sich eine Energieabsenkung bzw. Energieerhöhung des Zustands, so dass für Elektronen die Zustände mit den Energien $E_{n,+1/2}$ und $E_{n+1,-1/2}$ entartet sind. Ebenfalls analog zum Harmonischen Oszillator ergeben sich die Wellenfunktionen der Landau-Level $\Psi_{n,k_z,\sigma}$ zu [60]:

$$\Psi_{n,k_z,\sigma} \propto \Phi_n(x) = C \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{2l_B^2}\right) H_n\left(\frac{x-x_0}{l_B}\right), \quad (5.4)$$

wobei $\Phi_n(x)$ der Wellenfunktion des Harmonischen Oszillators, H_n dem n -ten Hermiteschen Polynom und $l_B = \sqrt{\hbar/(|e|B)}$ der magnetische Länge entspricht. Durch die Kenntnis der Wellenfunktion lässt sich ebenfalls der Radius eines Landau-Levels zu:

$$r_n = \langle \Psi | (x - x_0)^2 | \Psi \rangle = \langle \Psi | (r - R)^2 | \Psi \rangle = l_B \sqrt{2n + 1} \quad (5.5)$$

bestimmen [61]. Eine Veranschaulichung des Verhaltens von Kristallelektronen im externen Magnetfeld ist in Abbildung 5.1 dargestellt. Durch den Einfluss eines magnetischen Feldes in z -Richtung sind k_x und k_y nicht mehr unabhängig voneinander, weshalb Zustände, die ohne Magnetfeld isotrop im k -Raum verteilt sind, auf Kreisen mit definierten Energieeigenwerten (Landau-Level) kondensieren. Die Zustandsdichte $\rho(E)$ eines 2D-Elektronengases, die ohne Magnetfeld konstant

ist, kondensiert damit auf δ -förmige Singularitäten, die unter realen Bedingungen (thermische Verbreiterung, Lebenszeitverbreiterung) Lorentz-Kurven mit endlicher Breite entsprechen (vgl. [59]). Einen Sonderfall für den vorgestellten Formalismus ist der Einfluss von Randeffekten. So ist Gleichung 5.2 nur dann korrekt, wenn keine Randeffekte das freie Elektronengas innerhalb des Zyklotronorbits stören. In den Randgebieten der Probe muss demnach die Landau-Quantisierung getrennt betrachtet werden, was zu zusätzlichen Effekten wie dem im folgenden Kapitel 5.2.1 beschriebenen Quanten-Hall-Effekt führt.

5.2 Der Topologische Isolator

Neben den bekannten Materialklassen wie Metall oder Isolator existiert, wie jüngste Forschungen zeigen, eine weitere Materialklasse: Der topologische Isolator (TI). Dabei vereint der TI die Eigenschaften verschiedener Materialklassen, indem er isolierendes Verhalten im Volumen zeigt und leitendes Verhalten an den Oberflächen. Die physikalischen Eigenschaften der Oberflächenzustände unterscheiden sich jedoch in vielerlei Hinsicht gravierend von den Eigenschaften reiner Metalle. So sind die Oberflächenzustände unter anderem Spin-polarisiert und durch die Topologie geschützt [6, 7]. In den folgenden Kapiteln soll eine Einführung in die Eigenschaften von TI gegeben werden, von den theoretischen Grundlagen bis hin zur Erklärung des Verhaltens von 3D-TI-Materialien der 2. Generation, wie das in dieser Arbeit untersuchte Probensystem Sb_2Te_3 . Für eine bessere Vorstellung, was man unter topologischem Schutz eines Zustands versteht, soll hier vorläufig die Definition der topologischen Äquivalenzklasse übersprungen werden und erst ein Beispiel für einen topologisch geschützten Zustand, den Quanten-Hall-Zustand, gebracht werden.

5.2.1 Der Quanten-Hall-Effekt

Wie im Kapitel über Elektronen im Magnetfeld 5.1 angedeutet, muss der Formalismus der Landau-Kondensation in Anwesenheit von Randbedingungen separat betrachtet werden. Den experimentellen Nachweis dieser Randeffekte konnte von Klitzing [4] in Form des Quanten-Hall-Effekts (QHE) in 2D Elektronengasen innerhalb großer magnetischer Felder erbringen. Im klassischen Hall-Effekt wird eine Spannung zwischen zwei Kontakten einer leitenden Platte angelegt (oBdA. in x -Richtung) und dadurch ein Strom induziert. Wird nun ein Magnetfeld senkrecht zur Platte (z -Richtung) angelegt, so wirkt auf die bewegten Ladungsträger eine Lorentzkraft und es entsteht eine Potentialdifferenz in y -Richtung, die Hall-Spannung [20]. Im Gegensatz zum klassischen Hall-Effekt werden im Quanten-Hall-Effekt die Temperatur der Platte so niedrig und das Magnetfeld so hoch gesetzt,

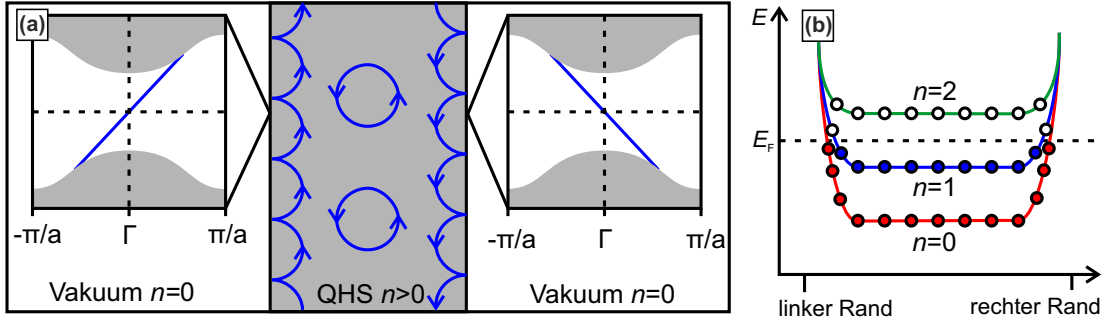


Abbildung 5.2: Schematische Darstellung des Quanten-Hall-Effekts. (a) Die Zyklotronbahnen der Landau-Niveaus der Elektronen im magnetischen Feld sind in den Randbereichen nicht vollständig geschlossen. Durch den Drehsinn der Lorentzkraft ergeben sich hierdurch Randzustände mit definierter Richtung der Gruppengeschwindigkeit (nach [6]). (b) Energieeigenwert des Landau-Zustands in Abhängigkeit der Position. Durch den Bruch der Zyklotronbahn erhöht sich die Energie des LL und der Eigenwert schneidet nahe der Ränder die Fermi-Energie (nach [5]).

dass wie in Abbildung 5.1(c) dargestellt kein energetischer Überlapp zwischen den einzelnen Landau-Level mehr besteht. Wird die Energie der LL durch das Magnetfeld so gewählt, dass die Fermi-Energie E_F genau zwischen zwei LL liegt, so ist das LL unter E_F voll besetzt, während das nächst höhere komplett geleert ist. Dadurch verhält sich das System wie ein Isolator, die Leitfähigkeit ist also null: $\sigma_{xx} = j_x/E_x = 0$. Semi-klassisch lässt sich dies dadurch erklären, dass sich die Elektronen auf Kreisen mit den jeweiligen Zyklotron-Radien r_C bewegen und damit innerhalb des Materials lokalisiert sind, also nicht zur Leitfähigkeit beitragen (vgl. Abbildung 5.2(a)) [5].

Nach diesem Modell wäre die Hall-Leitfähigkeit, also die Leitfähigkeit senkrecht zur Potentialdifferenz σ_{yx} ebenfalls null. Von Klitzing konnte 1980 in Transportmessungen jedoch nachweisen, dass diese Leitfähigkeit gerade nicht null ist, sondern quantisierte Werte in Abhängigkeit der besetzten LL n annimmt: $\sigma_{xy} = ne^2/h$. Die Erklärung hierfür liegt darin, dass an den Rändern der Probe die von den Elektronen beschrifteten Zyklotronbewegungen nicht vollständig innerhalb der Probe sind. Dies bewirkt einen Anstieg der Energie der Landau-Level, wenn der Abstand des Mittelpunkts der Zyklotronbewegung zum Probenrand in die Größenordnung von r_C kommt und damit zu einem Bereich, in dem die LL-Energie E_F schneidet, wie in Abbildung 5.2(b) dargestellt. 1992 konnten Chklovskii et al. [62] in selbstkonsistenten Rechnungen zeigen, dass es sich bei diesen Bereichen um metallische Streifen handelt, die 2000 von Weitz *et al.* [63] mit Hilfe von Rasterkraftmikroskopie experimentell nachgewiesen werden konnten.

Wie in Abbildung 5.2(a) jedoch ebenfalls ersichtlich, ergeben sich für diese Randzustände aufgrund der vorgegebenen Drehrichtung durch das Magnetfeld spezielle

Eigenschaften. So ist die Richtung der Leitfähigkeit abhängig von der Richtung des Magnetfeldes und der Geometrie des Probenrandes. Da für jeden Probenrand nur eine Ausbreitungsrichtung erlaubt ist, ist aber Rückstreuung von Elektronen, also Streuung, bei der Anfangs- und Endzustand entgegengesetzte Gruppengeschwindigkeiten besitzen, unmöglich. Aufgrund des Zusammenhangs mit dem Drehsinn der Lorentzkraft werden die Randzustände auch als chiral bezeichnet.

Diese Eigenschaft ist insbesondere für die hohe Präzision verantwortlich, mit der die Quantifizierung der Leitfähigkeit gemessen werden kann. Die theoretische Beschreibung des QHE durch Thouless, Kohmoto, Nightingale und den Nijs (TKNN) [64] unter Anwendung des Kubo-Formalismus konnte weiterhin zeigen, dass sich den Bloch-Wellenfunktionen $|u_m\rangle$ der Landau-Quantisierung eine Phasenbeziehung zuordnen lässt, die Berry 1984 [65] auf allgemeine Systeme erweitern konnte. Demnach kann sich diese zustandsabhängige Phase (Berry Phase) $A_m = i\langle u_m | \nabla_k | u_m \rangle$ innerhalb eines geschlossenen Ringintegrals im \vec{k} -Raum nur um Vielfache von 2π ändern. Durch eine Transformation dieses Ringintegrals in ein Oberflächenintegral lässt sich eine Invariante n_m formulieren (TKNN- oder Chern-Invariante), wenn man den dadurch entstehenden Berry-Fluss \mathcal{F}_m über die gesamte Brillouin-Zone integriert [6]:

$$n_m = \frac{1}{2\pi} \int d^2\vec{k} \mathcal{F}_m \quad \text{mit} \quad \mathcal{F}_m = \nabla_k \times A_m \quad (5.6)$$

Die Summation über alle besetzten Bänder m führt hierbei wieder genau auf die quantisierte Leitfähigkeit $\sum_0^n n_m = n$. Aufgrund der Summe wird n auch als totale Chern-Invariante bezeichnet [6]. Berücksichtigt man, dass die totale Chern-Invariante Rückschlüsse auf die Randzustände eines Systems zulässt, kann nun recht einfach die topologische Äquivalenzklasse definiert werden, was im folgenden Kapitel nachgeholt werden soll.

5.2.2 Topologische Äquivalenzklassen

Wie im vorigen Kapitel gezeigt lässt sich die Topologie eines Systems zum Beispiel anhand der totalen Chern-Invariante n definieren. Da die Chern-Invariante der Anzahl an Randzuständen entspricht, die E_F schneiden, kann also festgehalten werden, dass zwischen zwei Materialien unterschiedlicher totaler Chern-Invariante topologisch geschützte Grenzflächenzustände existieren, während zwischen Materialien gleicher Chern-Invariante keine solchen Grenzflächenzustände auftreten.⁸ Somit lassen sich auf Basis der Chern-Invarianten Äquivalenzklassen definieren,

⁸Da jedes Material an seinen Grenzen Oberflächen- oder Randzustände besitzt, bezieht sich im Folgenden der Begriff Rand- oder Oberflächenzustand auf topologische Randzustände welche die Bandlücke schließen.

wobei Materialien gleicher Äquivalenzklasse im Übergang zueinander keine Randzustände aufweisen.

Fasst man das oberste besetzte Landau-Niveau als Valenzband und das niedrigste nicht besetzte Landau-Niveau als Leitungsband auf, so lässt sich die obige Definition auf beliebige Materialien mit vollständiger Energielücke erweitern. Analog zum Fall der Chern-Invarianten besteht demnach eine Äquivalenzklasse aus allen Materialien, die kontinuierlich ineinander überführt werden können, ohne diese Energielücke zu schließen [6, 7].

Als Referenzmaterial hierfür bietet sich Vakuum an. Die Energielücke bildet hierbei die Energie, die nötig ist, ein Elektron-Positron-Paar zu bilden [6]. Basierend auf dieser Überlegung lassen sich freie Elektronen als Leitungsband und freie Positronen als Valenzband auffassen. Da im Vakuum kein Quanten-Hall-Effekt auftritt besitzt Vakuum die Chern-Invariante $n = 0$. Isolatoren, Halbleiter und Supraleiter besitzen ebenfalls Bandlücken und da im Übergang von diesen Materialien ins Vakuum keine Randzustände entstehen, besitzen alle dieselbe Chern-Invariante [7]. Im Gegensatz dazu besitzt ein Quanten-Hall-System eine Chern-Invariante abhängig von der Anzahl an besetzten Landau-Niveaus. Da jedes dieser Landau-Niveaus im Übergang zum Vakuum genau einen Randzustand beisteuert, ist die Anzahl an Randzuständen durch die Topologie des Materials geschützt. Das heißt, dass durch kontinuierliche Transformationen, wie zum Beispiel Dotierung des Materials, kein Randzustand zerstört werden kann, solange die Bandlücke erhalten bleibt [6]. Zusammenfassend lässt sich damit sagen, dass in jedem topologischen Isolator eine Invariante existiert, die sich von der entsprechenden Invarianten im Vakuum unterscheidet und im Übergang die Existenz eines Randzustandes fordert.

Trotz der enormen Vorteile für elektrische Anwendungen, speziell die definierte Stromrichtung und Leitfähigkeit, gestaltet sich die technische Umsetzung eines Quanten-Hall-Systems in elektronischen Komponenten schwierig. Dies liegt insbesondere daran, dass für die Realisierung eines bei Raumtemperatur stabilen QH-Systems ein Abstand zweier LL in der Größenordnung 75 mV erforderlich ist (vgl. Kapitel 2.1.1). Basierend auf Gleichung 5.3, mit einer effektiven Masse von beispielsweise 0.4 Elektronenmassen, ergäbe sich hierfür ein erforderliches magnetisches Feld von $B \approx 230$ T, eine Feldstärke die im kontinuierlichen Betrieb derzeit nicht realisierbar ist.

Durch den experimentellen Nachweis der elektronischen Eigenschaften von Graphen durch Novoselov *et al.* [66, 67] und der damit verbundenen Realisierung eines Materials mit rein Dirac-artigen Zuständen an der Fermi-Energie ergab sich jedoch eine weitere Möglichkeit für die Realisierung eines topologischen Isolators: Der Quanten-Spin-Hall-Isolator.

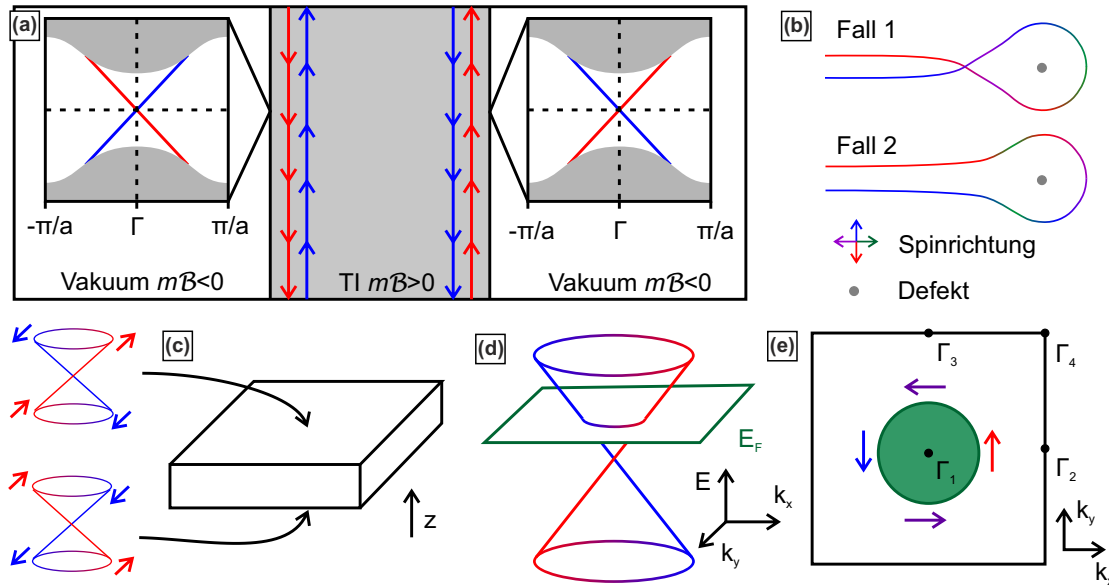
5.2.3 Der Quanten-Spin-Hall-Effekt und die \mathbb{Z}_2 -Invariante

Abbildung 5.3: Eigenschaften des Quanten-Spin-Hall-Isolators. (a) Darstellung eines 2D-QSH-Systems. Im QSHE ist die Gruppengeschwindigkeit der Randzustände an den Spin gekoppelt (nach [6]). (b) Schematische Darstellung der Rückstreuung. Da in beiden Fällen der resultierende Zustand aufgrund der TR-Symmetrie unterschiedliches Vorzeichen trägt, ist Rückstreuung verboten (nach [7]). (c) Darstellung der Oberflächendispersion eines 3D-QSH-Systems. (d) Darstellung des Dirac-Kegels mit Lage der Fermi-Energie. (e) 2D-projizierte Darstellung aus (d) mit Einzeichnung der TR-Invarianten Punkte Γ_i .

Grundlage des Quanten-Spin-Hall-Effekts (QSHE) ist die lineare elektronische Dispersion, wie sie z.B. in Graphen auftritt. Während konventionelle Metalle wie Silber den newtonschen Bewegungsgleichungen folgend eine quadratische Dispersionsrelation besitzen, zeigt Graphen durch die spezielle Gitterstruktur an zwei Punkten der Brillouin-Zone (\mathbb{K} und \mathbb{K}') eine lineare Dispersion [67]. Interessant hierbei ist, dass eine Kopplung zwischen Spin und Impulsrichtung auftreten kann, was bei quadratischer Dispersion, aufgrund des Verlusts der Richtungsinformation durch die Quadrierung, nicht möglich ist. In Anlehnung an die Dirac-Gleichung für Licht werden solche Systeme auch als Dirac-artig oder helikal bezeichnet. Auch wenn in Graphen im Gegensatz zu Licht die Helizität nicht bezüglich des realen Spins sondern bezüglich der zwei Komponenten der Wellenfunktion (Pseudo-Spin) definiert ist [68] und des Weiteren die Helizität an den beiden Hauptsymmetriepunkten \mathbb{K} und \mathbb{K}' entgegengesetzt ist, so ermöglicht die Existenz einer linearen Dispersion für Elektronenzustände neue Denkansätze zur Realisierung eines QSH-Systems (vgl. [69]). Analog zum Quanten-Hall-Effekt existieren beim QSHE ebenfalls Randzustände mit definierter Gruppengeschwindigkeit. Im Gegensatz zum

QHE ist beim QSHE jedoch nicht die Richtung der Hall-Leitfähigkeit sondern die Richtung der Spin-abhängigen Leitfähigkeit definiert. So ergeben sich wie in Abbildung 5.3(a) dargestellt für jeden Rand zwei Zustände, deren Gruppengeschwindigkeit an die Spin-Richtung gekoppelt ist.

Die Hauptproblematik für die Existenz eines QSH-Systems ist die Zeitinversions-Symmetrie (engl. time reversal, TR) für Teilchen mit halbzahligen Spin [7]. In Abwesenheit eines TR-brechenden Einflusses, wie zum Beispiel eines Magnetfeldes, fordert die TR-Symmetrie für jeden Zustand die Existenz mindestens eines zweiten energetisch entarteten Zustands. Diese Forderung leitet sich direkt aus den anti-hermiteschen Eigenschaften des TR-Operators $\Theta^2 = -1$ her und wird als Kramers-Theorem bezeichnet [7]. Da zwei Zustände jedoch nur energetisch entartet sein dürfen, wenn sie sich in mindestens einer Quantenzahl unterscheiden, fordert dies insbesondere, dass die zwei Zustände unterschiedlichen Spin tragen müssen. In Systemen mit quadratischer Dispersion ist diese Relation durch die Spin-Entartung automatisch erfüllt. In Systemen mit linearer Dispersion fordert sie, dass die resultierenden Zustände mindestens am Γ -Punkt sowie den Randsymmetriepunkten der Brillouin-Zone erfüllt ist. Diese Punkte werden als Kramers- oder auch TR-Invariante Punkte Λ_i bezeichnet und es existieren in zwei Dimensionen genau vier dieser Punkte und in drei Dimensionen acht.

Da die topologische Eigenschaft die Existenz von Randzuständen ist, bietet sich an, basierend auf den bisherigen Erkenntnissen eine allgemeine Formulierung von Randzuständen für die Dirac-Gleichung zu formulieren und die notwendigen Bedingungen für deren Existenz direkt daraus abzuleiten. Eine um einen quadratischen Term in \vec{p} korrigierte Formulierung der Dirac-Gleichung in 2 Dimensionen lässt sich nach Shen [70] wie folgt formulieren:

$$h_{\pm} = v_F p_x \sigma_x \pm v_F p_y \sigma_y + (m v_F^2 - \mathcal{B} p^2) \sigma_z. \quad (5.7)$$

v_F entspricht hierbei einer Geschwindigkeit analog zur Lichtgeschwindigkeit in der Vakuum-Dirac-Gleichung, m der Teilchenmasse und \mathcal{B} einer Größe der Dimension einer inversen Masse. Die Einführung des Masseterms $m v_F^2 \sigma_z$ ist dabei notwendig, um eine Bandlücke zu erzeugen, sodass das Material im Volumen nicht leitfähig ist. Die Einführung des zusätzlichen Terms $\mathcal{B} p^2 \sigma_z$ ergibt sich durch die spätere Definition einer inversen Bandlücke, was einer Invertierung der Dirac-Masse von Elektronen bzw. Löchern entspricht. Da die unkorrigierte Dirac-Gleichung jedoch nicht zwischen Teilchen und Anti-Teilchen unterscheidet, lässt sich mit der Dirac-Gleichung ohne Korrekturterm diese Definition nicht treffen. Sowohl h_+ wie auch h_- verletzen zwar die TR-Symmetrie des Systems, die Kombination aus beiden innerhalb des 4-dimensionalen Dirac-Vektors ist jedoch unter TR-Operationen invariant [70].

Um die Randzustände zu ermitteln, wird in dieses System nun an einer beliebigen Stelle eine Grenzbedingung eingeführt, zum Beispiel entlang der y -Achse:

$x = 0$. Die Anschlussbedingung an das Vakuum fordert, dass die Wellenfunktion des Randzustands an der Grenzfläche null sein muss. Des Weiteren sollte die Wellenfunktion, da es sich um einen Randzustand handeln soll, innerhalb der Fläche ebenfalls exponentiell abfallen. Löst man die dadurch entstehende Differentialgleichung unter den gegebenen Nebenbedingungen, so ergeben sich die folgenden Wellenfunktionen [70]:

$$\Psi_{1,2} = \frac{C}{\sqrt{2}} r_{1,2}^{\vec{r}} (e^{-x/\xi_+} - e^{-x/\xi_-}) e^{ip_y y/\hbar}, \vec{r}_1 = \begin{pmatrix} \text{sgn}(\mathcal{B}) \\ 0 \\ 0 \\ i \end{pmatrix}, \vec{r}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ \text{sgn}(\mathcal{B}) \\ i \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (5.8)$$

Die Existenz und die Eigenschaften der Randzustände sind weitgehend geprägt durch die Eigenschaften der Abklinglängen ξ_{\pm} , welche sich wie folgt darstellen lassen [70]:

$$\xi_{\pm}^{-1} = \frac{v}{2|\mathcal{B}|\hbar} \left(1 \pm \sqrt{1 - 4m\mathcal{B} + 4\mathcal{B}^2 p_y^2 / v_F^2} \right). \quad (5.9)$$

Entwickelt man nun die Wurzel für $\mathcal{B} \rightarrow 0$ so erhält man für die beiden Lösungen:

$$\xi_+ \approx \mathcal{B}\hbar/v_F \quad \text{und} \quad \xi_- \approx \hbar/(mv_F). \quad (5.10)$$

Dies führt aber insbesondere für unterschiedliche Vorzeichen von m und \mathcal{B} zu einer Divergenz einer der beiden Lösungen. Somit existiert ein Randzustand nur bei gleichen Vorzeichen von m und \mathcal{B} was aufgrund der Definition aus Gleichung 5.7 gleichbedeutend mit der Forderung nach einer invertierten Bandlücke ist. Des Weiteren wird deutlich, dass für $m \rightarrow 0$ die Abklinglänge ξ_- unendlich groß wird und der Randzustand zu einem Flächenzustand wird. Dies bedeutet, dass die Entstehung von Randzuständen an eine Bandlücke gekoppelt ist. Für die Dispersionsrelation der Randzustände ergibt sich:

$$E_{p_y, \pm}^{2D} = \pm v_F p_y \text{sgn}(\mathcal{B}); \quad (5.11)$$

es existieren also zwei Zustände mit entgegengesetzter Fermi-Geschwindigkeit $\pm v_F$, die aufgrund der Zeitumkehrinvarianz zusätzlich entgegengesetzten Spin tragen müssen (vgl. Abb. 5.3(a)). Verallgemeinert man dieses Modell auf drei Dimensionen, so ergeben sich ähnliche Lösungen für die Randzustände, wobei der Hamiltonoperator bzw. die Dispersionsrelation des Oberflächenzustands in diesem Fall (ohne Einschränkung $z = 0$)

$$H_{p, \pm}^{3D} = \pm v_F \text{sgn}(\mathcal{B}) (p_x \sigma_x + p_y \sigma_y), \quad (5.12)$$

$$E_{p, \pm}^{3D} = \pm v_F \text{sgn}(\mathcal{B}) p \quad \text{mit} \quad p = \sqrt{p_x^2 + p_y^2}, \quad (5.13)$$

dem Dirac-Kegel aus Abbildung 5.3(c) entspricht. Berechnet man die TKNN-Invariante dieses Systems nach Gleichung 5.6, so ergeben sich zwei Terme

$n_{\pm} = \pm(\text{sgn}(m) + \text{sgn}(\mathcal{B}))/2$ deren Summe unabhängig von m und \mathcal{B} null ergibt: Ein Quanten-Spin-Hall-System zeigt demnach keinen Quanten-Hall-Effekt. Werden n_+ und n_- jedoch voneinander abgezogen, so lässt sich eine weitere Invariante $n_{\sigma} = (n_+ - n_-)/2$ definieren, auf deren Basis sich die \mathbb{Z}_2 -Invariante als $\nu = n_{\sigma} \bmod 2$ darstellen lässt [6]. In diesem Fall ergeben sich im vorgestellten Modell zwei Möglichkeiten: $\text{sgn}(m) = \text{sgn}(\mathcal{B}) \rightarrow \nu = 1$ oder $\text{sgn}(m) = -\text{sgn}(\mathcal{B}) \rightarrow \nu = 0$. Diese beiden Fälle unterscheiden sich hinsichtlich ihrer Topologie und beschreiben den Spin-Strom an den Oberflächen, wie in Abbildung 5.3(a) dargestellt.

Durch die Spin-Polarisierung der Randzustände ergeben sich im QSHE ähnliche Eigenschaften hinsichtlich des Ladungstransports wie beim Quanten-Hall-System. So ist die Rückstreuung von Teilchen an unmagnetischen Defekten im Oberflächenzustand eines QSH-Systems unterdrückt. Ursache hierfür ist die Zeitumkehr-Invarianz der Dirac-artigen Zustände. Wie in Abbildung 5.3(b) gezeigt, existieren für die Streuung des Teilchens zwei Möglichkeiten. Die Endzustände beider Streuevents sind jedoch aufgrund der unterschiedlichen Drehrichtung des Spins um 360° verschoben. Durch die anti-hermitesche Eigenschaft des TR-Operators Θ bedeutet jedoch eine Drehung um 360° gleichzeitig eine Invertierung der Phase der Wellenfunktion: $\Theta^2|\Psi\rangle = -|\Psi\rangle$. Damit besitzen die beiden möglichen Endzustände der Streuung unterschiedliche Vorzeichen und interferieren somit destruktiv [7]. Unter der Annahme gleicher Wahrscheinlichkeit beider Ergebnisse bedeutet dies aber, dass Rückstreuung unterdrückt ist.

Das selbe Prinzip ist ebenso verantwortlich dafür, dass sich Teilchen auf den Oberflächen von TI nicht durch elektrostatische Potentiale wie ionisierten Störstellen lokalisieren lassen (Anderson Lokalisierung). Im Gegensatz zu konventionellen 2D-Elektronengasen, die durch zufällig angeordnete elektrische Potentiale lokalisiert werden können, würde die dadurch resultierende Rückstreuung im Fall eines TI-Oberflächenzustands wieder zu destruktiver Interferenz der Wellenfunktion führen und ist somit ebenfalls unterdrückt. Aus diesem Grund werden die Oberflächenzustände eines TI basierend auf der obigen Definition auch als schwach anti-lokalisiert bezeichnet. Wie angedeutet sind diese Aussagen jedoch nur für den Fall rein elektrostatischer Defekte gültig. Besitzt eine Störstelle ebenfalls magnetische Eigenschaften, so ist die TR-Symmetrie des Oberflächenzustands lokal gebrochen und folglich Rückstreuung erlaubt [6, 7].

Ein allgemeinerer Ansatz zur Berechnung der \mathbb{Z}_2 -Invarianten basiert auf der Arbeit von Fu, Kane und Mele [71–73]. Demnach reicht zur Bestimmung der topologischen Eigenschaft die Untersuchung der Symmetrie an den Hauptsymmetriepunkten Γ_i der Brillouin-Zone eines Materials. Dazu wird angenommen, dass sich zum Beispiel ein 2D-System als Oberfläche eines Zylinders mit Umfang einer

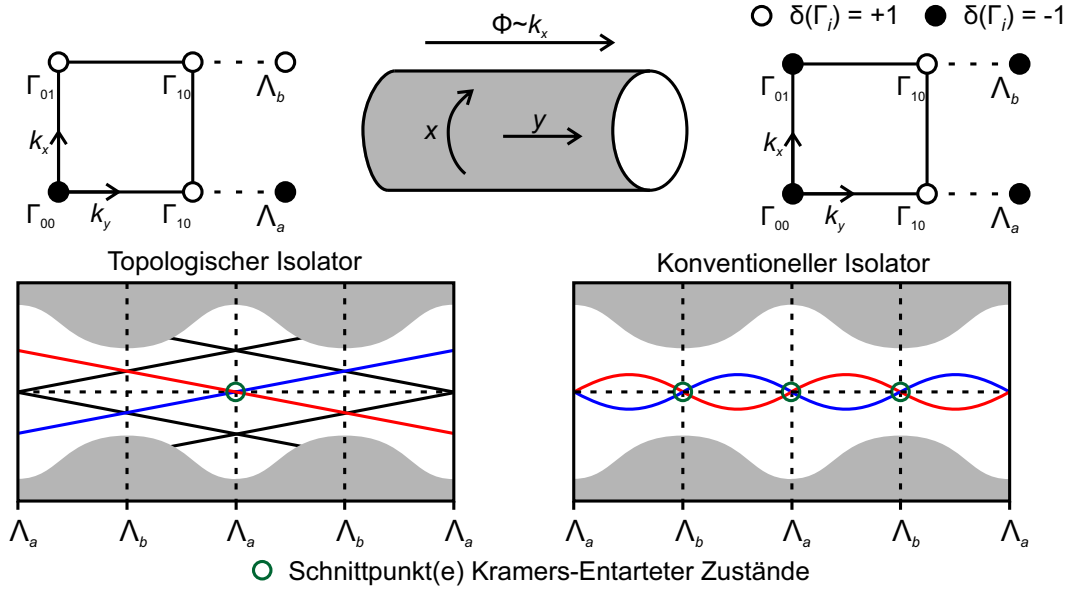


Abbildung 5.4: Bestimmung der \mathbb{Z}_2 -Invarianten eines 2D-Systems nach Fu, Kane und Mele. Wird ein 2D-Elektronengas auf einen Zylinder abgebildet, so lässt sich die Topologie über die Projektionen Λ_a und Λ_b der Hauptsymmetriepunkte Γ_i bestimmen. Die Verbindung der Projektionen innerhalb der Brillouin-Zone gibt dabei Aufschluss über die Anzahl an Schnittpunkten zweier Kramers-entarteter Zustände und die Topologie des Systems (nach [71–73]).

Gitterkonstanten beschreiben lässt, wie in Abbildung 5.4 dargestellt. Unter dieser Voraussetzung kann man die Zustände der Hauptsymmetrieachsen $k_x = 0 \equiv \Lambda_a$ und $k_x = \pi/a \equiv \Lambda_b$ ebenfalls als magnetischen Fluss Φ interpretieren, der den Zylinder durchfließt und respektive die Werte $\Phi = 0$ oder $\Phi = h/(2e)$ annimmt. Die \mathbb{Z}_2 -Invariante gibt in diesem Fall Aufschluss darüber, ob sich die Zeitumkehr-Polarisierung im kontinuierlichen Übergang von Λ_a nach Λ_b ändert und ein topologisch geschützter Randzustand vorliegt oder nicht. Die Zeitumkehr-Polarisierung π einer Oberfläche lässt sich dabei wie folgt bestimmen [72]:

$$\pi_a = \delta_{a1}\delta_{a2} \quad \text{mit} \quad \delta_i = \frac{\sqrt{\det[w(\Gamma_i)]}}{\text{Pf}[w(\Gamma_i)]} = \pm 1. \quad (5.14)$$

Hierbei ist $\text{Pf}[w(\Gamma_i)]$ die Pfaffsche-Determinante der unitären $2N \times 2N$ Matrix mit $w_{mn}(\vec{k}) = \langle u_{m,-k} | \Theta | u_{n,k} \rangle$. Die Elemente dieser Matrix entsprechen also den Übergängen zwischen Bloch-Funktionen einzelner Bänder mit positiven und negativen Wellenvektoren und sind damit insbesondere anti-symmetrisch, womit gilt: $\text{Pf}[w]^2 = \det[w]$. Die \mathbb{Z}_2 -Invariante ν_0 oder die Änderung der Zeitumkehr-Polarisierung lässt sich dann als Vorzeichen der Multiplikation über alle vier Haupt-

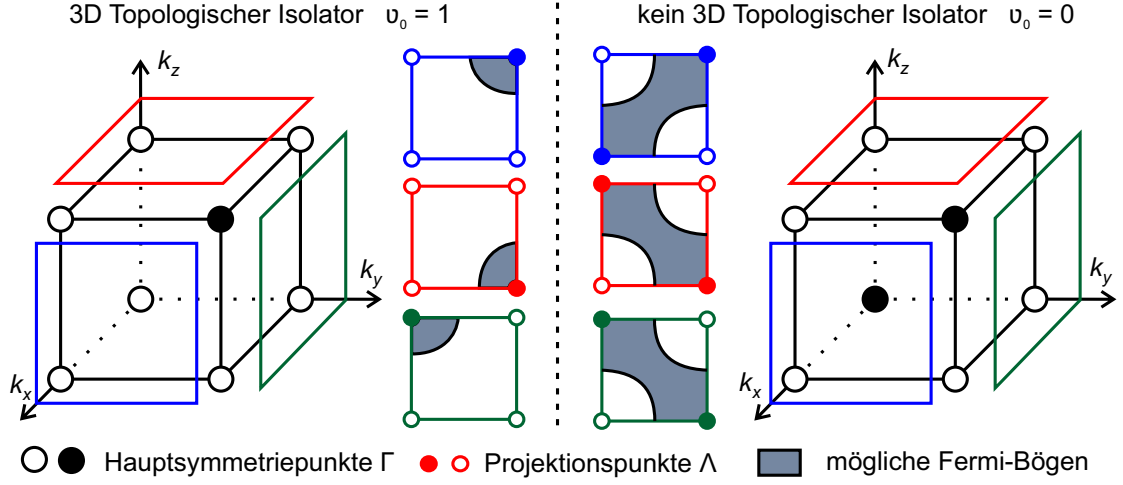


Abbildung 5.5: Übersicht der Projektionen der Hauptsymmetriepunkte Γ auf die verschiedenen Oberflächen. Während im Fall des topologischen Isolators ($\nu_0 = 1$, links) mögliche Fermi-Bögen auf allen Oberflächen eine ungerade Anzahl an Projektionspunkten einschließen, existieren im Fall $\nu_0 = 0$ mindestens zwei Oberflächen, bei denen wenn überhaupt eine gerade Anzahl an Projektionspunkten eingeschlossen ist (nach [72]).

symmetriepunkte δ_i identifizieren [72]:

$$(-1)^{\nu_0} = \pi_a \pi_b = \prod_i \delta_i. \quad (5.15)$$

Wie in Abbildung 5.4 zu sehen lässt sich die Änderung der TR-Polarisierung dabei mit dem Verhalten zweier Kramers-entarteter Zustände innerhalb der Brillouin-Zone erklären. Während im topologisch trivialen Fall an den relevanten Punkten Λ_a und Λ_b die gleichen Zustände entartet sind, tauschen die entsprechenden Zustände im Fall des topologischen Isolators ihre Partner. Damit ist im Fall des TI sichergestellt, dass die Zustände die komplette Bandlücke schließen, was in konventionellen Isolatoren nicht der Fall ist.

Sämtliche Aussagen gelten ebenfalls für 3D-Systeme, wobei durch die zusätzliche Dimension die Anzahl der TR-invarianten Punkte Γ_i auf acht erweitert werden muss. Ebenfalls lassen sich in diesem Fall weitere topologische Invarianten $\nu_{1,2,3}$ definieren, die den Produkten der Γ_i in den jeweiligen Richtungen der reziproken Gittervektoren $n_{1,2,3}$ entsprechen [72]:

$$(-1)^{\nu_k} = \prod_{n_k=1, n_{j \neq k}=0,1} \delta_{i=(n_1 n_2 n_3)}. \quad (5.16)$$

Jedoch gibt auch in 3D-Systemen ausschließlich ν_0 Aufschluss über die Existenz topologisch geschützter Oberflächenzustände auf jeder Oberfläche. Wie in Abbildung 5.5 beispielhaft gezeigt, garantiert eine ungerade Anzahl an Punkten mit

$\delta_i = -1$, dass auf jeder Oberfläche eine ungerade Anzahl an Projektionspunkten Λ von möglichen Fermi-Bögen umschlossen wird. Dies ist notwendig für das Entstehen eines Dirac-Kegels, mit den in Abbildung 5.3(c,d,e) gezeigten Eigenschaften. Eine weitere Vereinfachung der Rechnung ergibt sich, wenn innerhalb des Systems Inversions-Symmetrie herrscht. Da in diesem Fall den Bloch-Funktionen $|u_m(\vec{k})\rangle$ an den TR-invarianten Punkten Paritätseigenwerte ξ zugeordnet werden können, lassen sich die entsprechenden δ_i über die Multiplikation der Paritäten aller besetzten Bänder darstellen [72]:

$$\delta_i = \prod_{m=1}^N \xi_{2m}(\Gamma_i) \quad \text{mit} \quad \xi_{2m}(\Gamma_i) = \pm 1. \quad (5.17)$$

Alle im folgenden vorgestellten theoretischen Voraussagen über die Topologie von Probensystemen basieren auf dieser Art der Berechnung der \mathbb{Z}_2 -Invarianten.

5.2.4 Der 2D-Topologische Isolator

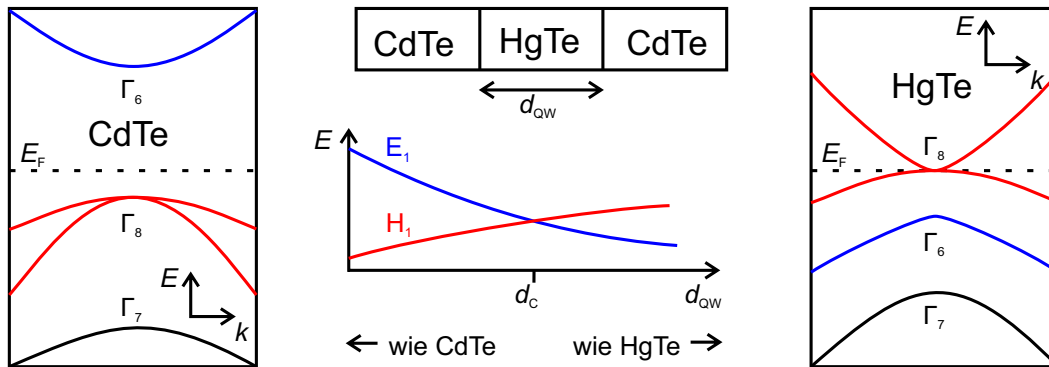


Abbildung 5.6: Der 2D-Topologische Isolator CdTe-HgTe-CdTe. Links bzw. rechts sind die Volumenzustände von CdTe und HgTe abgebildet. Bei HgTe ist die energetische Reihenfolge der Bänder Γ_6 und Γ_8 invertiert. Innerhalb der Schichtstruktur ändert sich die Energie der Quantenzustände E_1 und H_1 abhängig von der Schichtdicke d_{QW} . Oberhalb von d_C invertiert sich die Reihenfolge der Bänder und das System wird zu einem 2D TI (nach [74]).

Die erste experimentelle Realisierung eines topologischen Isolators basiert auf der theoretischen Arbeit von Bernevig, Hughes und Zhang [74]. Die Idee zur Realisierung des TI besteht dabei aus einer geschichteten Anordnung von HgTe und CdTe. Während CdTe bezüglich seiner elektronischen Struktur ein normaler Halbleiter ist, gehört HgTe zur Klasse der Halbleiter ohne Bandlücke (zero-gap semiconductor). Durch die starke Spin-Bahn-Wechselwirkung aufgrund des schweren Elements Quecksilber ist die Bandanordnung innerhalb von HgTe zudem invertiert. Die Inversion wird klar, wenn man die Bandordnung innerhalb von CdTe näher

betrachtet (vgl. Abbildung 5.6). In CdTe besteht das Valenzband aus p-artigen Bändern (Γ_8, Γ_7), während das Leitungsband aus s-artigen Bändern (Γ_6) besteht. In HgTe invertiert sich die Reihenfolge dieser Bänder und das geteilte Γ_8 -Band stellt sowohl das Valenzband als auch das Leitungsband dar. Da beide Bänder im Γ -Punkt entartet sind, besitzt HgTe keine Bandlücke. Wird nun eine dünne Schicht HgTe zwischen zwei Schichten CdTe eingebettet, so ergibt sich je nach Schichtdicke d_{QW} eine unterschiedliche Bandstruktur. Für dünne Schichten $d_{\text{QW}} < 6.3 \text{ nm}$ übernimmt die Bandstruktur des Schichtsystems die normale Bandanordnung von CdTe, wohingegen für dicke Schichtdicken die invertierte Bandstruktur von HgTe bestehen bleibt. Der Übergang zwischen beiden Situationen kann dabei als topologischer Phasenwechsel angesehen werden, bei dem sich die Masse des Systems invertiert. Zur Bestimmung des genauen Verhaltens eventuell entstehender Randzustände ist eine nähere Betrachtung der Struktur des Valenz- (H_1) bzw. Leitungsbandes (E_1) nötig: H_1 entsteht aus dem ursprünglichen $|\Gamma_8, m_j = \pm 3/2\rangle$ Band und E_1 aus einer Linearkombination zwischen $|\Gamma_8, m_j = \pm 1/2\rangle$ und $|\Gamma_6, m_j = \pm 1/2\rangle$. Da $|\Gamma_8, m_j = \pm 3/2\rangle$ ungerade Parität besitzt, während $|\Gamma_6, m_j = \pm 1/2\rangle$ gerade Parität hat, bedeutet dies, dass Randzustände, die die Bandlücke schließen, ebenfalls ungerade Parität besitzen müssen. Dies wäre in niedrigster Ordnung proportional zu k . Damit ergeben sich für die Randzustände genau die Forderungen, die im vorigen Modell angesetzt wurden. Die experimentelle Realisierung dieses Systems gelang König *et al.* [75] im Jahr 2007. Dabei konnte in Transportmessungen nachgewiesen werden, dass ab einer Schichtdicke von $d_{\text{QW}} > 6.3 \text{ nm}$ das System geschützte Randzustände mit definierter Leitfähigkeit $\sigma = 2e/h$ besitzt. Der Faktor 2 im Vergleich zum QHE lässt sich hierbei darauf zurückführen, dass im Gegensatz zum QHE beide Randkanäle zur Leitfähigkeit beitragen.

5.2.5 Der 3D-Topologische Isolator

Die Voraussetzungen für das Entstehen topologischer Randzustände können weitgehend von zwei auf drei Dimensionen erweitert werden. So gelten für den ersten experimentell realisierten 3D-Topologischen Isolator $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ nahezu die gleichen Eigenschaften wie für den im vorigen Kapitel vorgestellten Schichtzustand. Das Probensystem $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ wurde dabei von Fu und Kane [72] sowie Teo *et al.* [77] als 3D-TI vorgeschlagen und von Hsieh *et al.* [78] 2008 erstmals in ARPES-Messungen (= winkelaufgelöste Photo-Elektronen-Spektroskopie) bestätigt. Wie im Fall des Schichtsystems besitzt eine Komponente, in diesem Fall Antimon, eine invertierte Bandlücke und gehört zur Klasse der Halbmetalle. Die andere Komponente, Bismut, hat dagegen eine normal geordnete Bandlücke und gehört ebenfalls zu den Halbmetallen [6]. Analog zur Schichtdicke von HgTe öffnet sich in einem gewissen Bereich der Konzentration $0.07 < x < 0.22$ in $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ die Bandlücke, wobei das System in diesem Konzentrationsbereich die Ordnung der Bandlücke von Antimon

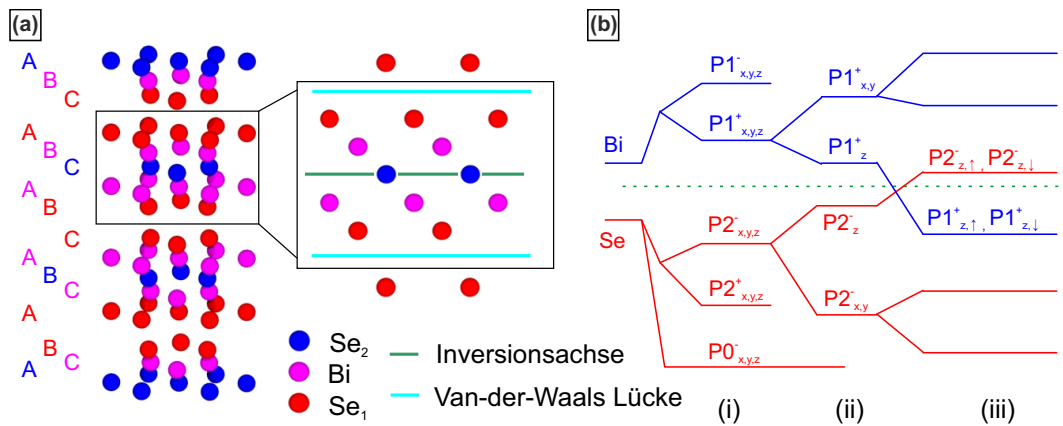


Abbildung 5.7: Kristallstruktur und Energietermschema von Bi_2Se_3 . (a) Kristallstruktur von Bi_2Se_3 . Der Kristall besteht aus stark gebundenen Schichten von jeweils fünf Lagen, die durch Van-der-Waals-Kräfte zusammengehalten werden. Die Atome der Mittellage stellen Inversionszentren dar und bilden die äußeren Lagen aufeinander ab. (b) Termschema von Bi und Se in Bi_2Se_3 . Die Bereiche berücksichtigen jeweils zusätzlich den Einfluss von (i) chemischer Bindung, (ii) Kristallfeld und (iii) Spin-Bahn-Kopplung (nach [76]).

übernimmt. Aufgrund der Inversions-Symmetrie in Antimon lassen sich wie im Fall des 2D-TI die Paritäten der Bänder im Valenz- und Leitungsband bestimmen. Das Ergebnis ist, dass entstehende Randzustände ungerade Parität tragen, also Dirac-artiges Verhalten zeigen. Die weitere Suche nach Materialien, die topologische Eigenschaften zeigen, führte 2009 zur Entdeckung der topologischen Eigenschaften von gleich drei neuen Verbindungen, Bi_2Te_3 , Bi_2Se_3 und Sb_2Te_3 durch Zhang *et al.*[76] und Xia *et al.* [79]. Die Vorteile dieser Probensysteme gegenüber $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ sind die vergleichsweise große Bandlücke sowie die Eigenschaft, dass nur ein Dirac-Kegel im Zentrum der Brillouin-Zone existiert. Des Weiteren stellen diese Probensysteme keine Legierungen, sondern kristalline Strukturen dar, was die Herstellung dieser Verbindungen maßgeblich vereinfacht[6]. Die Kristallstruktur von Bi_2Se_3 ist in Abbildung 5.7(a) dargestellt. Bi_2Se_3 besteht aus einer Schichtstruktur aus jeweils fünf Lagen, wobei die Atome einzelner Lagen hexagonal angeordnet sind. Jede Lage ist abwechselnd mit Bismut oder Selen besetzt und die Schichtfolge ist ähnlich dem kubisch-flächenzentrierten Gitter ABCAB. Die einzelnen Schichten sind durch die vergleichsweise schwachen Van-der-Waals-Bindungen gekoppelt, weshalb die Oberflächen senkrecht zur z -Richtung üblicherweise aus Selen-Lagen bestehen. Wie die bereits vorgestellten Materialien besitzen alle drei Verbindungen eine inverse Bandlücke mit Dirac-artigem Verhalten. Da bisher immer nur die Existenz einer inversen Bandlücke gefordert wurde, nicht jedoch auf die physikalische Ursache der inversen Bandlücke eingegangen wurde, soll dies hier nun am Beispiel Bi_2Se_3 nachgeholt werden. Abbildung 5.7(b) zeigt eine schematische Ener-

gietermstruktur von Bi_2Se_3 in Abhängigkeit unterschiedlicher Wechselwirkungen nach [76]. Beginnend mit den atomaren p-Orbitalen von Bismut und Selen wird hierbei schrittweise der Einfluss der chemischen Bindung (i), des Kristallfelds (ii) und der Spin-Bahn-Kopplung (iii) im Termschema berücksichtigt. Dabei wird deutlich, dass sich durch den Einfluss der Spin-Bahn-Kopplung die Reihenfolge der zwei Zustände $|P1_{z,\uparrow\downarrow}^+\rangle$ und $|P2_{z,\uparrow\downarrow}^-\rangle$ energetisch vertauscht, wobei sich + und – wieder auf die Parität der nun hybridisierten Zustände bezieht. Das Zusammenspiel der invertierten Bandlücke mit dem damit verbundenen Paritätswechsel führt wie in den vorigen Fällen zur Entstehung Dirac-artiger Oberflächenzustände, die Hsieh *et al.* [80] wiederum mit ARPES-Messungen auf Bi_2Te_3 und $\text{Bi}_{2-\delta}\text{Ca}_\delta\text{Se}_3$ nachweisen konnten. Des Weiteren konnten Hsieh *et al.* in Spin-polarisierten Messungen zeigen, dass die Oberflächenzustände abhängig ihrer \vec{k} -Richtung unterschiedlichen Spin tragen, was ein Nachweis der prognostizierten Eigenschaften des Dirac-Kegels darstellt. In Rastertunnelmikroskopie-Messungen konnten Zhang *et al.* 2009 ebenfalls das Verbot der Rückstreuung auf Bi_2Te_3 durch QPI-Messungen nachweisen.

5.3 Elektronen im magnetischen Feld - Teil II

Durch die speziellen Eigenschaften der Oberflächenzustände topologischer Isolatoren muss das Verhalten im magnetischen Feld nochmals getrennt betrachtet werden. Dabei können jedoch die Ansätze, welche in den Kapiteln 5.1 bzw. 5.2.3 verwendet wurden, weitgehend übernommen werden. Um eine möglichst vollständige Beschreibung des Systems zu erhalten, nehmen wir dabei zunächst analog zu Kapitel 5.2.3 für den Hamiltonoperator eine Superposition aus Dirac-artigen und freien Elektronen an [81]:

$$\hat{H} = \hbar v_F(p_x \sigma_x + p_y \sigma_y) + B p^2 \hat{I}, \quad p^2 = p_x^2 + p_y^2 \quad (5.18)$$

mit der Einheitsmatrix \hat{I} . Analog zu Kapitel 5.1 wird ein Magnetfeld in z -Richtung angenommen und die Landau-Eichung für das Vektorpotential angewandt. Da im Gegensatz zum klassischen Fall ebenfalls komplexe Terme auftauchen wird zusätzlich der Impuls p durch den quantenmechanischen Impulsoperator $p_x = -i\hbar\partial_x$ ersetzt. In Matrixschreibweise ergibt sich dadurch für den Hamiltonoperator:

$$\hat{H} = \begin{bmatrix} D[(-i\partial_y + x/l_B^2)^2 - \partial_x^2] & \hbar v_F(-i\partial_x - i\partial_y - ix/l_B^2) \\ \hbar v_F(-i\partial_x + i\partial_y + ix/l_B^2) & D[(-i\partial_y + x/l_B^2)^2 - \partial_x^2] \end{bmatrix}. \quad (5.19)$$

Der y -abhängige Teil der Differentialgleichung kann nun separiert werden, indem man für die Wellenfunktion in y -Richtung ebene Wellen annimmt: $\Psi(r) = \Psi(x) e^{iky} \Leftrightarrow -i\partial_y \Psi(r) = k_y \Psi(r)$. Des Weiteren werden die dimensionslosen Parameter $X = x/l_B$ und $X_0 = k_y l_B$ eingeführt und darauf Leiteroperatoren

$$a = 1/\sqrt{2}(\partial_X + X + X_0) \quad a^\dagger = 1/\sqrt{2}(-\partial_X + X + X_0) \quad (5.20)$$

5.3 Elektronen im magnetischen Feld - Teil II

definiert. Mit Hilfe der Leiteroperatoren lässt sich der Hamiltonoperator wie folgt formulieren:

$$\hat{H} = \begin{bmatrix} (2D\hbar^2/l_B^2)[aa^\dagger + 1/2] & (-i\sqrt{2}\hbar v_F/l_B)a \\ (i\sqrt{2}\hbar v_F/l_B)a^\dagger & (2D\hbar^2/l_B^2)[aa^\dagger + 1/2] \end{bmatrix}. \quad (5.21)$$

Die Form des Hamiltonoperators mit den alleinstehenden Stufenoperatoren in den nicht-diagonal Elementen legt für die Lösung der Wellenfunktion den Ansatz $\Psi^\dagger(n) = [\alpha\langle n-1|, \beta\langle n|]$ mit den Lösungen des eindimensionalen Harmonischen Oszillators $\Phi_n = |n\rangle$ nahe. Führt man zusätzlich die Abkürzungen $\epsilon_1 = 2D\hbar^2/l_B^2$ und $\epsilon_2 = \sqrt{2}\hbar v_F/l_B$ ein, die beide der Dimension einer Energie entsprechen, so lassen sich die Energieeigenwerte über die Relation $\det[\hat{H} - E\hat{I}] = 0$ berechnen:

$$E_n = \epsilon_1 n \pm \sqrt{(\epsilon_1/2)^2 + \epsilon_2^2 n}. \quad (5.22)$$

Aus Gründen der Vollständigkeit sei hier erwähnt, dass der Zustand $\Phi_{n=-1}$ im Harmonischen Oszillator nicht existiert und die Wellenfunktion für $\Psi_n = 0$ deshalb folgende Form annimmt: $\Psi_{n=0}^\dagger = [0, \beta\langle 0|]$. Für ein reines Dirac-System ($\epsilon_1 = 0$) ergibt sich somit:

$$E_n = \text{sgn}(n)\hbar v_F/l_B\sqrt{2|n|} = \text{sgn}(n)v_F\sqrt{2e|n|B\hbar}. \quad (5.23)$$

Analog zum quadratischen Fall lassen sich durch die Kenntnis der Wellenfunktionen die Radien der Landau-Bahnen innerhalb eines Dirac-artigen Systems bestimmen [61]:

$$\sqrt{\langle \Psi | (r - R)^2 \hat{I} | \Psi \rangle} = \begin{cases} l_B & n = 0 \\ l_B\sqrt{2|n|} & n \neq 0 \end{cases}. \quad (5.24)$$

6 STM-Messungen auf Antimon-Tellurid Sb_2Te_3

Im folgenden Kapitel sollen die Ergebnisse eigener STM-Messungen auf Sb_2Te_3 präsentiert werden. Dabei soll zuerst eine Einordnung unserer Ergebnisse in bereits veröffentlichte STM-Messungen von Jiang *et al.* [82] und Pauly *et al.* [22] auf diesem Probensystem vorgenommen sowie die Datenbearbeitung für die Auswertung detailliert beschrieben werden. Das Augenmerk liegt hierbei auf der Formation von Landau-Resonanzen innerhalb starker externer magnetischer Felder. Darauf wird eine genaue Analyse der energetischen Verbreiterung einzelner LL diskutiert, die über bestehende Veröffentlichungen hinausgeht, und eine physikalische Erklärung der von uns gefundenen Zusammenhänge präsentiert. Darüber hinaus wird der Einfluss der lokalen energetischen Landschaft auf die Energie einzelner LL diskutiert. Die gefundenen Ergebnisse werden wiederum in den Zusammenhang bestehender Veröffentlichungen eingeordnet und mögliche physikalische Erklärungen für das gemessene Verhalten vorgestellt.

6.1 Landau-Level-Spektroskopie auf Sb_2Te_3

Abbildung 6.1 zeigt eine erste Übersicht der Ergebnisse eigener Messungen auf Sb_2Te_3 unter einem externen Magnetfeld von bis zu 12 T. Die Probe wurde dabei unter Anwendung der modifizierten Bridgman Technik gezüchtet, wobei der Temperaturgradient an der Kristallisationsfront ungefähr 10 K/cm betrug [83]. Die Spaltung der Probe erfolgte unter Verwendung eines Spaltstempels innerhalb des UHV-Systems bei einem Basisdruck von unter $p < 10^{-10}$ mBar. Die Spaltung selbst wurde analog zur in der Diplomarbeit von Thomas Bathon [84] vorgestellten Methode ausgeführt.

Diagramm (a) zeigt eine Reihe von Spektroskopien an derselben Stelle der Probe bei unterschiedlichen externen Feldern. Um eine Verschiebung der Position, beispielsweise durch thermische Driftbewegungen während der Magnetfeldänderung, auszuschließen wurde für jedes Magnetfeld eine topographische Messung durchgeführt und die Position der Spektroskopie anhand von Defektmustern neu bestimmt. Die Probentemperatur der im Folgenden vorgestellten Ergebnisse lag laut Cernox-Sensor am Probenhalter bei $T_{\text{Probe}} = (1.50 \pm 0.05)$ Kelvin. Die Messung

6 STM-Messungen auf Antimon-Tellurid Sb_2Te_3

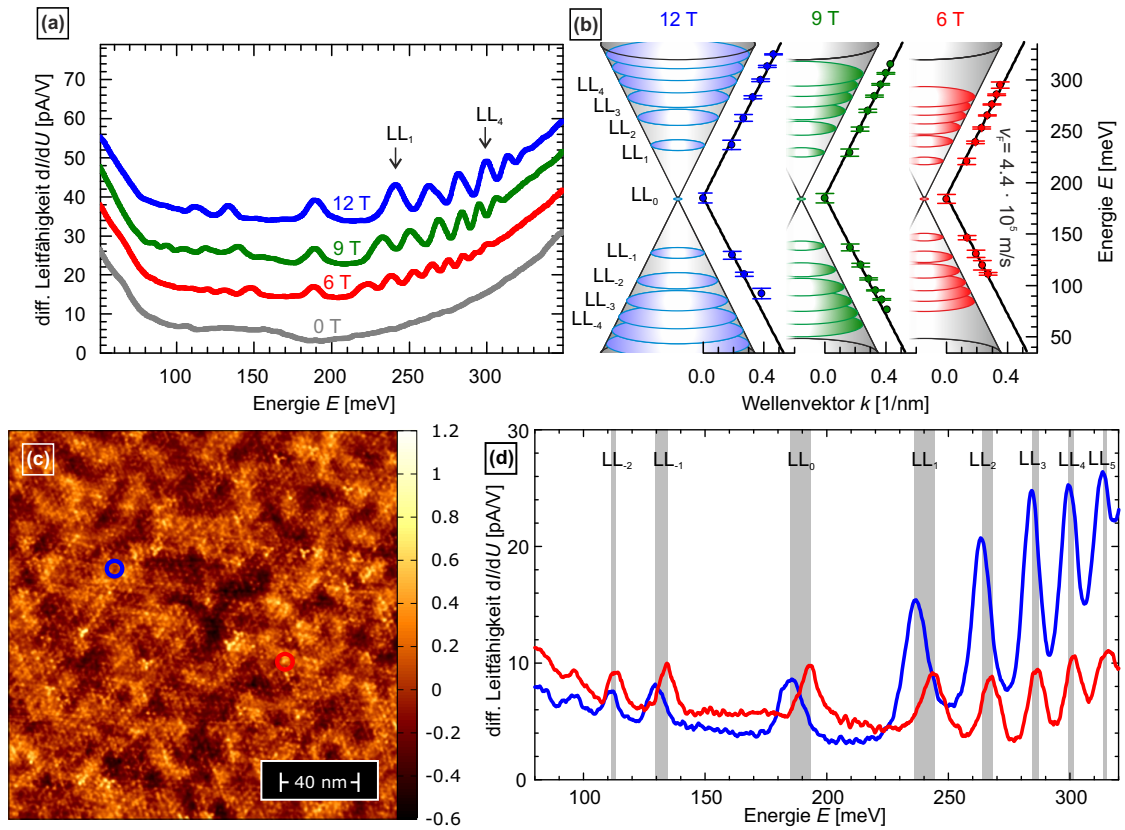


Abbildung 6.1: Übersichtsmessungen auf Sb_2Te_3 (a) Punktspektroskopien bei unterschiedlichen Magnetfeldern B ($U_{\text{SP}} = 350$ mV, $I_{\text{SP}} = 500$ pA, $U_{\text{mod}} = 2$ mV). Die Indizierung der LL ist für die Indizes 1 und 4 bei 12 T exemplarisch eingezeichnet. (b) Dispersionsrelation der einzelnen LL bei unterschiedlichen Feldstärken. Die einzelnen LL zeigen eine lineare Dispersion mit $v_{\text{F}} \approx 4.4 \cdot 10^5$ m/s. (c) Topographische Messung der Sb_2Te_3 -Oberfläche ($U_{\text{B}} = 350$ mV, $I_{\text{SP}} = 500$ pA). (d) Punktspektroskopien an den in (c) markierten Positionen (Einstellungen wie in (a)). Die Energie des Maximums einzelner LL variiert mit der Position, wobei die Abweichung für geringere LL-Indizes größer wird.

bei 0 T lässt sich dabei grob in drei Bereiche unterteilen: Einen starken Abfall der Zustandsdichte unterhalb 80 meV, einen Bereich ähnlicher Zustandsdichte mit einem Tiefpunkt bei ≈ 190 meV und einen mäßigen Anstieg beginnend zwischen 200 meV und 250 meV. Der Abfall bzw. Anstieg für niedrige und hohe Energien kann dabei durch das Einsetzen der Valenz- bzw. Leitungsbander im Volumen erklärt werden [22]. Das Minimum wird üblicherweise mit dem Dirac-Punkt E_{D} des Oberflächenzustands identifiziert und erlaubt somit zusammen mit den beiden anderen Energien eine Einordnung des Oberflächenzustands in die Bandlücke. Aus den Messungen im externen Magnetfeld wird deutlich, dass mit zunehmendem Feld Resonanzen innerhalb der Zustandsdichte entstehen, die sich zusätzlich

abhängig vom Feld verschoben. Diese Resonanzen entsprechen der Kondensation der Oberflächenzustände auf Landau-Niveaus, deren physikalische Eigenschaften im Folgenden näher betrachtet werden sollen. Ordnet man den einzelnen Resonanzen die entsprechenden LL-Indizes zu, beginnend mit $n = 0$ für die Resonanz am Dirac-Punkt E_D , und trägt die Energie gegen $|\vec{k}| = \sqrt{2e|n|B/\hbar}$ auf, so ergibt sich die in Abbildung 6.1(b) dargestellte Dispersionsrelation. Das Verhalten entspricht dabei nahezu perfekt der theoretischen Erwartung aus Gleichung 5.23 mit einer Fermi-Geschwindigkeit von $v_F \approx 4.4 \cdot 10^5 \text{ m/s}$. Dieser Wert stimmt mit früheren Messungen auf Sb_2Te_3 von Jiang *et al.* ($v_F \approx 4.3 \cdot 10^5 \text{ m/s}$ [82]) und Pauly *et al.* ($v_F \approx 4.2 \cdot 10^5 \text{ m/s}$ [22]) gut überein.

Eine erste qualitative Analyse der Breite einzelner LL zeigt, dass die Breite der Resonanzen mit zunehmender Energie abnimmt, was im Widerspruch zum erwarteten Verhalten aus bisherigen Veröffentlichungen steht [22]. Wie in der topographischen Aufnahme (Abbildung 6.1(c)) zu sehen ist, zeigt die Oberfläche Bereiche unterschiedlicher Höhe sowie zahlreiche Defekte unterschiedlicher Art. Die am deutlichsten auftretenden Defekte in Form von dreizähligen Erhöhungen entsprechen dabei Ersetzungen eines Te-Atoms durch ein Sb-Atom [$\text{Sb}_{\text{Te}(1)}$] in der obersten Te-Atomlage [22, 82]. Die Höhenunterschiede variieren in Abhängigkeit der BIAS-Spannung U_B , was nahelegt, dass es sich hierbei nicht um topographische Höhenunterschiede, sondern um lokale Variationen der Zustandsdichte handelt.

Diese Vermutung bestätigt sich anhand der in (d) dargestellten Spektroskopiekurven an zwei unterschiedlichen Positionen der Probenoberfläche. Die genauen Orte der Spektroskopien sind dabei in der Topographieaufnahme farblich gekennzeichnet. Wie deutlich zu sehen ist, unterscheiden sich die Spektroskopiekurven der beiden Positionen deutlich voneinander. Neben der unterschiedlichen Intensitätsverteilung der Zustandsdichte in Abhängigkeit der Energie fällt hinsichtlich der Verteilung der Landau-Level auf, dass die Positionen der Maxima der einzelnen LL energetisch zueinander verschoben sind, wobei die Verschiebung für höhere LL abnimmt. Zur besseren Verdeutlichung dieses Effekts ist der Bereich zwischen den Maxima gleicher LL-Indizes der beiden Spektroskopiekurven grau hinterlegt. Basierend auf diesen Beobachtungen wurden zusätzliche Spektroskopien an elf verschiedenen Punkten der Probe für drei unterschiedliche magnetische Felder und ohne externes Feld gemessen. Die Ergebnisse dieser Messungen sollen im Folgenden vorgestellt werden. Zunächst soll jedoch die Analysemethode selbst, also die Schritte der Datenverarbeitung zur Bestimmung der Eigenschaften der spezifischen Landau-Resonanzen, kurz erläutert werden.

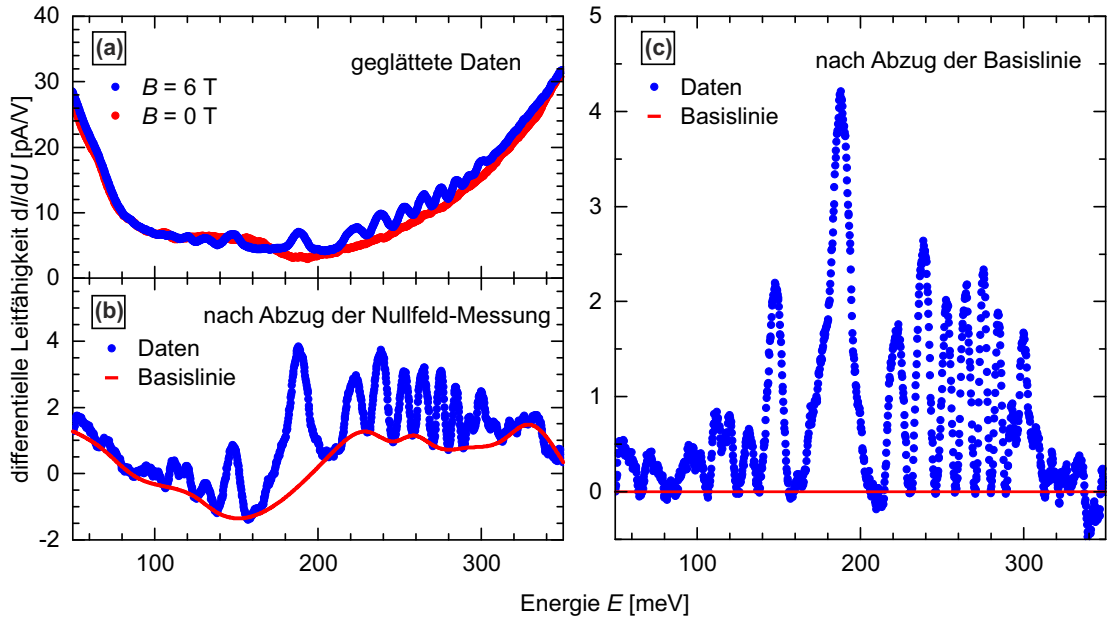


Abbildung 6.2: Datenverarbeitung zur Bestimmung der LL-Eigenschaften. (a) Spektroskopien mit und ohne angelegtem magnetischen Feld ($U_{SP} = 350$ mV, $I_{SP} = 500$ pA, $U_{mod} = 2$ mV). (b) Differenz der Spektroskopien in (a) und Basislinie durch Verbinden der Täler benachbarter LL. (c) Resultierende Daten nach Abzug der Basislinie.

6.1.1 Datenverarbeitung zur Bestimmung der Eigenschaften von Landau-Level

Abbildung 6.2 zeigt die vorgenommenen Schritte zur Bestimmung der Eigenschaften einzelner LL. Jedes hier vorgestellte Spektrum wurde in einem Spannungsbereich von -20 mV bis 350 mV (also jeweils ca. 100 mV unter- bzw. oberhalb der Valenzband-Oberkante und Leitungsband-Unterkante) aufgezeichnet und besteht aus 1481 Einzelmessungen, was bezüglich der Punktdichte einem energetischen Auflösungsvermögen von $250 \mu\text{V}$ entspricht. Die differentielle Leitfähigkeit wurde dabei mit der in Kapitel 2.2.2 vorgestellten Lock-In Technik bestimmt, wobei die Modulationsspannung $U_{mod} = 2$ mV betrug. Damit ergibt sich bezüglich des realen energetischen Auflösungsvermögens unter Berücksichtigung der Proben temperatur von ≈ 1.5 K nach Gleichung 2.10 $\Delta E \approx 3.6$ meV. Die Integrationszeit pro Punkt betrug 20 ms bei einer im Lock-In eingestellten Zeitkonstanten von 10 ms. Jeder Datenpunkt besteht dabei aus dem gemittelten Wert von fünf Durchgängen jeweils mit ansteigender und fallender Spannung, um eventuell auftretende lineare z -Driftbewegungen der Spitze zu kompensieren. Aufgrund der ungefähr zwölf mal schlechteren realen Energieauflösung verglichen mit der energetischen Punktdichte, wurden die Daten zusätzlich geglättet, indem jeder Punkt mit seinen acht nächs-

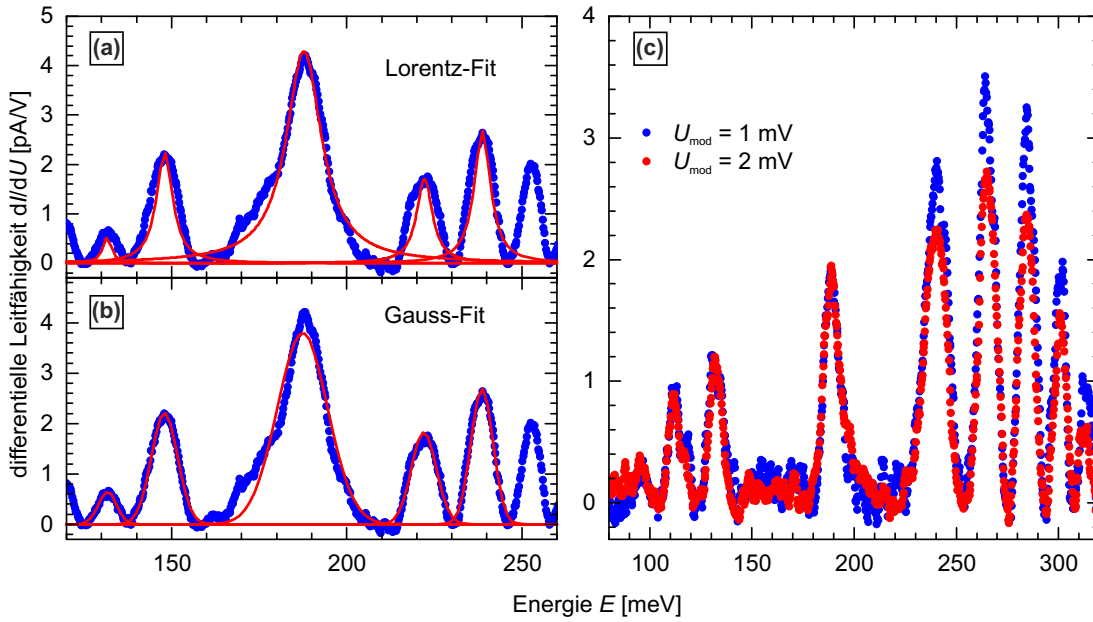


Abbildung 6.3: Vergleich unterschiedlicher Fit-Funktionen und Modulationsspannungen. (a) Fit der einzelnen LL mit Lorentz-Funktionen. (b) Fit der einzelnen LL mit Gauss-Funktionen. (c) Unterschiede in den Resonanzen für verschiedene Modulationsspannungen U_{mod} (restliche Einstellungen wie in Abbildung 6.2).

ten Nachbarn zu gleichen Teilen gemittelt wurde.

Diagramm (a) zeigt beispielhaft zwei Spektroskopiekurven an einem Punkt mit und ohne externes Feld. Da die lokale Zustandsdichte einer Messung sowohl Informationen über die Oberflächenzustände wie auch die Volumenzustände enthält, unser Hauptaugenmerk jedoch auf dem Verhalten der Oberflächenzustände liegt, wurde in einem weiteren Schritt die Nullfeld-Messung von der Messung im magnetischen Feld abgezogen. Die daraus resultierende Kurve entspricht damit der Änderung der Zustandsdichte in Abhängigkeit des externen Magnetfelds und ist in Diagramm (b) dargestellt. Da Änderungen der Zustandsdichte jedoch nicht nur auf den Oberflächenzustand beschränkt sind, sondern ebenfalls Änderungen der Zustandsdichte in den Volumenzuständen der Probe oder der Spitze entsprechen können, wurde in einem weiteren Schritt eine Basislinie, basierend auf Spline-Fits mit Stützstellen an den Minima zwischen benachbarten Landau-Resonanzen, von der Messkurve abgezogen. Die Notwendigkeit dieser Prozedur wird in Schaubild (c) deutlich, da jetzt jedes LL individuell mit einer Gauss- bzw. Lorentzfunktion gefittet werden kann.

Abbildung 6.3 zeigt das Ergebnis des Fits der Daten mit (a) Lorentzkurven und (b) Gaußkurven. Dabei wurden innerhalb jedes Fits alle erkennbaren LL gleich-

zeitig gefittet um Überlagerungseffekte zu berücksichtigen. Wie deutlich zu sehen, entspricht die Form des nullten LL (mittig bei ca. 190 meV) dabei eher einer Lorentzkurve während alle anderen Resonanzen eher ein Gauß-artiges Verhalten zeigen. Dieser Unterschied kann jedoch über die angelegte Modulationsspannung erklärt werden. Abbildung 6.3(c) zeigt die Gegenüberstellung einer Spektroskopiekurve mit $U_{\text{mod}} = 2 \text{ mV}$ und einer Messung mit $U_{\text{mod}} = 1 \text{ mV}$. Dabei wird deutlich, dass das nullte LL nahezu die gleiche Form behält, während die LL mit höherem Index tendenziell bei gleicher Breite größer werden und damit eher der Lorentz-Form entsprechen. Ein Vergleich der gefitteten Werte bezüglich der Breite und Position der Kurven zeigt jedoch keine signifikanten Abweichungen.

6.1.2 Analyse der energetischen Verbreiterung einzelner LL

Die energetische Verbreiterung von Zuständen wird insbesondere bei spektroskopischen STM-Messungen üblicherweise auf eine endliche Lebensdauer der gemessenen Zustände zurückgeführt. Die Verbindung zwischen energetischer Breite und Lebensdauer ist dabei die Heisenbergsche Unschärferelation, nach der die Energie in einem endlichen Zeitintervall nicht scharf messbar ist: $\Delta E \Delta t \geq \hbar/2$. Die endliche Lebensdauer eines mit STM gemessenen Zustands kann dabei durch den Messprozess selbst erklärt werden. Bei Messungen oberhalb der Fermi-Energie werden unter Annahme elastischer Tunnelprozesse Elektronen aus besetzten Spitzenzuständen in unbesetzte Probenzustände überführt. Da der nun besetzte Probenzustand energetisch höher liegt als das Fermi-Niveau, relaxiert das Elektron im zeitlichen Verlauf in unbesetzte, energetisch tiefer liegende Zustände. Für die energetische Abregung des Zustands sind Wechselwirkungen mit dem Probenystem erforderlich, von denen innerhalb der Literatur den drei Folgenden die größte Bedeutung zugeordnet wird [22, 82, 85, 86]:

Elektron-Elektron-Wechselwirkung

Die Elektron-Elektron-Wechselwirkung (EEW) beschreibt die Interaktion zwischen zwei oder mehreren Elektronen innerhalb eines Materials (vgl. Abbildung 6.4(a)). Vereinfacht gibt dabei ein Elektron seine Energie über ein Austauschteilchen an ein anderes Elektron ab. Dies bedeutet, dass ein Elektron mit hoher Energie in einen unbesetzten Zustand niedrigerer Energie übergeht, während ein Elektron in der Nähe der Fermi-Energie in einen energetisch höheren unbesetzten Zustand wechselt [87]. Dabei müssen sowohl Energie, wie auch Impuls durch die Streuung erhalten bleiben, was die Lage der möglichen Anfangs- und Endzustände beider Elektronen innerhalb der Brillouin-Zone stark eingrenzt. Je mehr Zustände zwischen dem angeregten Zustand (BIAS-Energie) und dem Fermi-Niveau existieren, desto größer ist die Wahrscheinlichkeit dieses Prozesses, weshalb die Lebensdauer

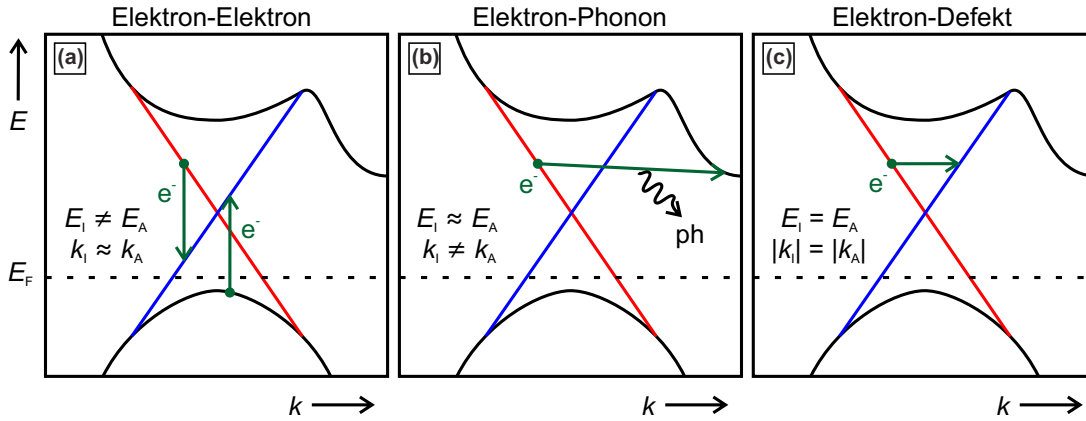


Abbildung 6.4: Übersicht möglicher Wechselwirkungen für angeregte Zustände. (a) Elektron-Elektron-Wechselwirkung: Ein Elektron gibt seine Energie an ein anderes Elektron ab. (b) Elektron-Phonon-Wechselwirkung: Ein Elektron ändert seinen Zustand unter Bildung eines Phonons. (c) Elektron-Defekt-Wechselwirkung: Ein Elektron wird elastisch z.B. an einem Defekt gestreut (nach [88]).

mit steigender Differenz zwischen BIAS-Spannung und Fermi-Energie sinkt. Dies bewirkt eine Verbreiterung der Probenzustände abhängig von der Differenz zwischen Energie des Zustands und der Fermi-Energie. Ein weiterer Einflussfaktor für die Stärke der EEW ist die Temperatur des Systems. Während bei $T = 0\text{ K}$ die Grenze zwischen besetzten und unbesetzten Zuständen scharf verläuft, steigt mit zunehmender Temperatur das Energieintervall in dem Zustände unterhalb der Fermi-Energie unbesetzt bzw. Zustände oberhalb E_F besetzt sind. Da dies wiederum mehr Möglichkeiten für Übergänge bewirkt, steigt der Einfluss der EEW mit der Temperatur [87].

Elektron-Phonon-Wechselwirkung

Die Elektron-Phonon-Wechselwirkung (EPW) beschreibt eine Zustandsänderung eines Elektrons unter Bildung oder Aufnahme eines Phonons (vgl. Abbildung 6.4(b)). Da bei tiefen Temperaturen kaum freie Phononen existieren, ist die Aufnahme eines Phonons im Falle der von uns ausgeführten Tieftemperaturmessungen vernachlässigbar gering. Da es sich bei Phononen um Gitterschwingungen handelt, deren Dispersionsrelation vergleichsweise flach verläuft, zeichnet sich die EPW durch hohe Impulsänderung bei niedriger Energieänderung aus. Dementsprechend steigt der Einfluss der Wechselwirkung mit der Anzahl der verfügbaren unbesetzten Zustände mit ähnlicher Energie aber unterschiedlichem \vec{k} -Wert. Da der Dirac-Punkt in Sb_2Te_3 innerhalb der Bandlücke liegt, also keine Volumenzustände bei ähnlicher Energie existieren, ist der Einfluss der EPW in der Nähe der Dirac-

Energie vernachlässigbar. Mit abnehmender oder zunehmender Energie gewinnt die EPW aufgrund des Überlapps mit Valenz- bzw. Leitungsbandzuständen an Gewicht, was zu einer Reduzierung der Lebensdauer in den entsprechenden Bereichen führt [22].

Elektron-Defekt-Wechselwirkung

Die Elektron-Defekt-Wechselwirkung (EDW) beschreibt die Streuung eines Elektrons an Kristall-Defekten, wie zum Beispiel Fehlstellen oder Fremdatomen (vgl. Abbildung 6.4(c)). Da die Masse der Defekte im Vergleich zur Elektronenmasse groß ist, herrscht hierbei elastische Streuung, das heißt nur die Richtung des Wellenvektors ändert sich, während die Länge des Wellenvektors und damit die Energie gleich bleibt [89]. Aufgrund der Rotationssymmetrie des Dirac-Kegels kommen als mögliche Endzustände wieder nur Zustände auf dem Dirac-Kegel in Frage. Da diese jedoch wie in Abschnitt 5.2.3 ausgeführt Spin-polarisiert sind, ist die Streuung je nach Winkel zwischen Anfangs- und Endzustand unterdrückt. Aufgrund des Anstiegs der Anzahl möglicher Zustände mit Distanz zum Dirac-Punkt, ist davon auszugehen, dass der Einfluss diese Art der Wechselwirkung für höhere LL zu geringeren Lebenszeiten und damit zu einer Erhöhung der energetischen Breite führt.

Abbildung 6.5 zeigt die energetische Verteilung der Halbwertsbreite (engl. full width at half maximum, FWHM) für die von uns vorgenommenen Messungen. Der Unterschied zwischen (a) und (b) stellt dabei lediglich die Farbkodierung dar. Während in (a) die Farbe der einzelnen Messpunkte das dabei angelegte magnetische Feld B widerspiegelt, repräsentiert die Farbe in (b) den zugehörigen LL-Index der einzelnen Messpunkte. Ein Vergleich des Verhaltens zwischen unseren Messergebnissen und den drei vorgestellten möglichen Ursachen energetischer Verbreiterung zeigt signifikante Unterschiede. So spiegelt die Messung keine einheitliche Zunahme der FWHM mit Entfernung zur Fermi-Energie wider, was einen starken Einfluss der EEW auf die Ergebnisse ausschließt. Ebenso sind die Ergebnisse im Widerspruch zu dem erwarteten Verhalten für Einflüsse von EPW und EDW, da die FWHM mit zunehmender Entfernung zum Dirac-Punkt abnimmt. Vielmehr zeigen sich innerhalb der Farbkodierung zwei von diesen Effekten unabhängige Einflussgrößen: die Stärke des Magnetfelds und der Index des LL. So ist in Abbildung 6.5(a) deutlich ersichtlich, dass die energetische Breite mit zunehmendem Magnetfeld zunimmt. Ebenfalls wird in (b) deutlich, dass die FWHM mit zunehmendem LL-Index abnimmt. Da keine der vorgestellten Ursachen energetischer Verbreiterung von Zuständen mit unseren Messergebnissen übereinstimmt,

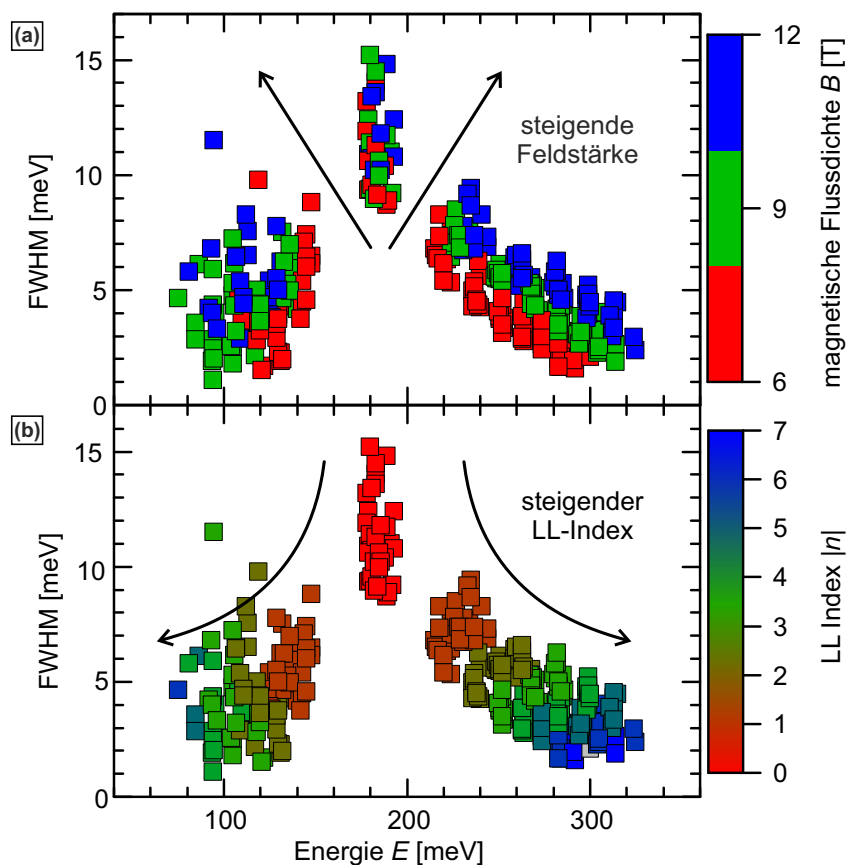


Abbildung 6.5: Übersicht der FWHM einzelner Landau-Resonanzen in Abhängigkeit der Energie. Die Diagramme beinhalten hierbei jede eindeutig identifizierte Landau-Resonanz an den elf Spektroskopiepositionen für die drei gemessenen Magnetfelder. (a) Farbkodierung nach magnetischer Feldstärke: Mit zunehmendem Feld wird die FWHM größer. (b) Farbkodierung nach LL-Index: Mit zunehmendem Index wird die FWHM geringer.

soll im Folgenden ein bisher auf topologischen Isolatoren nicht verwendeter Ansatz überprüft werden: die Energieunschärfe basierend auf Heisenbergs Prinzip der Unschärfe zwischen Ort und Impuls.

Energieunschärfe durch die Ort-Impuls-Unbestimmtheit

Neben der bereits vorgestellten Energie-Zeit-Unschärfe, die eine Korrelation zwischen Energie und Lebensdauer von Zuständen darstellt, postulierte Heisenberg ebenfalls, dass Ort und Impuls eines Zustands nicht gleichzeitig scharf messbar sind [90]. Dies leitet sich direkt aus der Unsicherheit der Energieeigenwerte zweier

nicht vertauschbarer Operatoren ab:

$$\Delta_A \Delta_B \geq \frac{1}{2} |\langle [A, B] \rangle|. \quad (6.1)$$

Hierbei entspricht $[A, B] = AB - BA$ dem Kommutator zwischen Operator A und B und $\Delta_{A,B}$ der zugehörigen Unsicherheit. Damit hängt die erwartete energetische Unschärfe Δ_E einer lokal beschränkten Messung Δ_r von dem Kommutator zwischen Ortsoperator x und Hamiltonoperator \mathcal{H} des Systems ab. Unter Verwendung des Hamiltonoperators eines topologischen Oberflächenzustands aus Gleichung 5.12 ergibt sich für die Energie-Ort-Unschärferelation: ⁹

$$\begin{aligned} \Delta_E \Delta_r &\geq \frac{1}{2} |\langle [\mathcal{H}, x] \rangle| \\ &\geq \frac{1}{2} |\langle [v_F p + eA, x] \rangle| \\ &\geq \frac{1}{2} |\langle [v_F p, x] + [eA, x] \rangle| \\ &\geq \frac{1}{2} \hbar v_F. \end{aligned} \quad (6.2)$$

Da v_F eine materialspezifische Konstante ist, die nicht von der Energie abhängt, ist die Energieunschärfe des Oberflächenzustands eines TI nur von der zugehörigen Ortsunschärfe begrenzt.

Wichtig hierbei ist, dass es sich bei diesem Effekt um eine spezifische Eigenschaft Dirac-artiger Systeme handelt. Eine analoge Rechnung für konventionelle Materialien mit quadratischer Dispersion kommt zum Ergebnis, dass die Energie-Ort-Unschärfe in diesem Fall proportional zum Erwartungswert des Impulsoperators ist, der in lokalen Zuständen, wie den in Kapitel 5.1 für Landau-Resonanzen angesetzten Zuständen des linearen Harmonischen Oszillators, null ist:

$$\begin{aligned} \Delta_E \Delta_r &\geq \frac{1}{2} \left| \left\langle \left[\frac{p^2}{2m_e}, x \right] \right\rangle \right| \\ &\geq \frac{1}{2} \left| \left\langle \frac{p}{2m_e} [p, x] + [p, x] \frac{p}{2m_e} \right\rangle \right| \\ &\geq \frac{1}{2} \frac{\hbar}{m_e} |\langle p \rangle| = 0. \end{aligned} \quad (6.3)$$

Damit ist die energetische Breite von Landau-Resonanzen in 2D-Elektronengasen wie dem Oberflächenzustand von Fe-dotiertem n-InAs(110) [91] oder Cs-dotiertem

⁹Vielen Dank an Prof. Dr. Björn Trauzettel für den Hinweis, dass für eine korrekte quantenmechanische Beschreibung das Vektorpotential ebenfalls berücksichtigt werden muss, was aufgrund der Linearität des Kommutators und der Vertauschbarkeit von Vektorpotential und Ort jedoch keine zusätzlichen Terme in der Unschärferelation bewirkt.

n-InSb(110) [92] nicht durch die Energie-Ort-Unschärferelation begrenzt und deren Energieeigenwerte sind in Abwesenheit Lebenszeit-begrenzender Einflüsse prinzipiell beliebig scharf messbar.¹⁰

Um die Energieunschärfe Δ_E eines Landau-Zustands in Dirac-artigen Materialien zu bestimmen ist es nach Gleichung 6.3 notwendig eine Abschätzung über die Ortsunschärfe Δ_x des entsprechenden Zustands zu treffen. Dafür lässt sich die Analogie zum harmonischen Oszillator nutzen. So entspricht die Varianz des Ortsoperators im harmonischen Oszillator $\Delta_x = \sqrt{\langle \Psi | x^2 | \Psi \rangle}$, was genau der Definition des Bahnradius eines LL aus Gleichung 5.24 entspricht.

Bei einer STM-Messung im untersuchten Energiebereich tunneln Elektronen von der Spitze in die Probe. Durch die exponentielle Abhängigkeit des Tunnelstroms vom Spitzen-Probe-Abstand lässt sich folgern, dass der größte Anteil des Tunnelstroms in Zustände direkt unterhalb der Spitze erfolgt. Da die einzelnen Landau-Resonanzen, wie in Abschnitt 5.3 beschrieben, jedoch eine quantisierte örtliche Varianz der Wellenfunktion Δ_x besitzen, lässt sich in Abhängigkeit der Spitzenposition ein Bereich abschätzen, in dem durch Spitzenelektronen angeregte Landau-Zustände existieren können. So kann das Zentrum eines Landau-Zustands maximal im Abstand Δ_x von der Spitzenposition entfernt sein, da sonst unterhalb der Spitze kein signifikanter Überlapp der Spitzenwellenfunktionen und der LL-Wellenfunktionen existiert. Ein weiterer Einflussfaktor ist der Spin der tunnelnden Elektronen bzw. deren Wellenvektor durch die Spin-Bahn-Kopplung innerhalb des TI. So kann ein Elektron mit definiertem Spin oder definierter Richtung des Wellenvektors immer nur in diejenige Zyklotronbahn tunneln, deren Spin und Impulsvektor an der Eintrittsstelle mit dem Elektron übereinstimmt. Damit beschränkt sich der örtliche Bereich in den ein Elektron tunneln kann auf den Durchmesser der Zyklotronbahn, also $\Delta_r = 2\Delta_x$. Zum besseren Verständnis ist diese Überlegung im Inset von Abbildung 6.6 nochmals schematisch dargestellt. Da somit nur ein limitierter Bereich der Probe gemessen wird, lässt sich die Heisenbergsche Unschärferelation anwenden und die Energieunschärfe des Tunnelprozesses explizit in Abhängigkeit des Magnetfeldes und des LL-Index formulieren:

$$\Delta_E \geq \frac{\hbar v_F}{2\Delta_R} = \begin{cases} \frac{v_F \sqrt{|e|B\hbar}}{2} & n = 0 \\ \frac{v_F \sqrt{|e|B\hbar}}{2\sqrt{2|n|}} & n \neq 0 \end{cases}. \quad (6.4)$$

Im Gegensatz zur energetischen Verbreiterung basierend auf endlicher Lebenszeit zeigt dieses Ergebnis die beiden in der Messung gefundenen Abhängigkeiten: ein Anstieg der Breite mit zunehmendem Magnetfeld und eine Abnahme der Ener-

¹⁰Vielen Dank hierbei an Prof. Dr. Markus Morgenstern, der uns auf Inkonsistenzen unserer ursprünglichen Theorie mit von ihm gemessenen Daten aufmerksam gemacht hat.

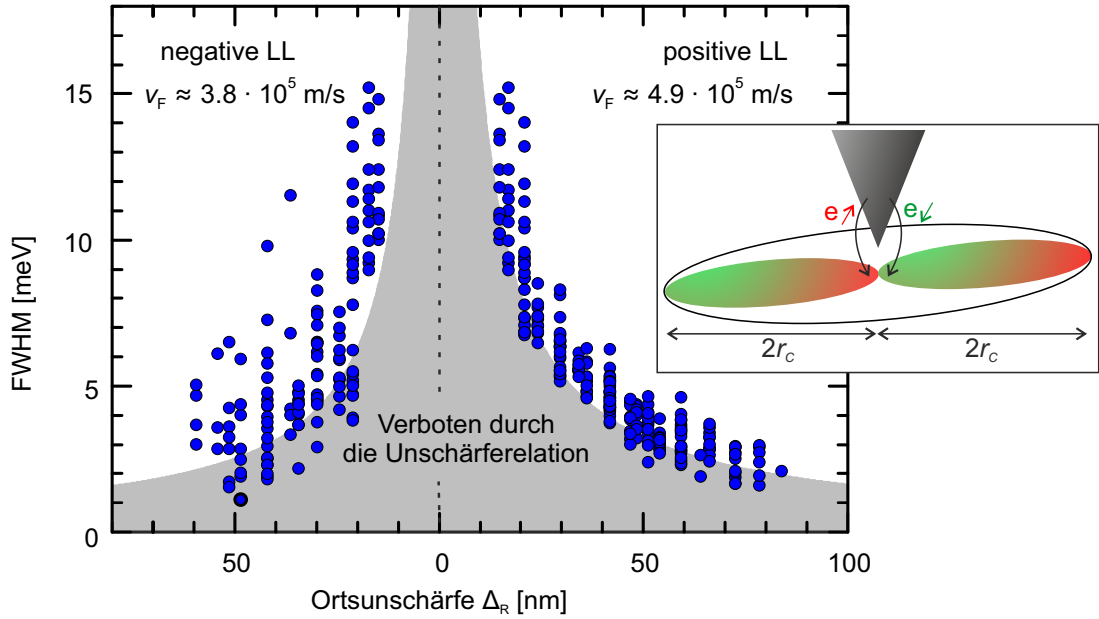


Abbildung 6.6: Energieunschärfe durch Ort-Impuls-Unbestimmtheit. Auftragung der FWHM der Landau-Resonanzen auf Sb_2Te_3 gegen das zweifache ihres Zyklotronradius (blaue Punkte). Die Messwerte der nullten Resonanz LL_0 sind dabei auf beiden Seiten eingezeichnet. Die graue Fläche markiert den Bereich, der die minimale Energieverbreiterung aus Gleichung 6.4 unterschreitet. Dabei sind die unterschiedlichen Fermi-Geschwindigkeiten für positive und negative LL berücksichtigt. Die FWHM der einzelnen LL folgen weitgehend der oberen Grenze des nach Gleichung 6.4 verbotenen Bereichs. Der Inset zeigt eine schematische Darstellung der örtlichen Varianz der Zustände, in die ein Spitzenelektron tunneln kann.

gieunschärfe mit ansteigendem LL-Index. Vielmehr ergibt sich sogar eine quantitative Übereinstimmung wenn man die FWHM jeder Landau-Resonanz gegen seine Varianz Δ_R aufträgt, wie in Abbildung 6.6 dargestellt. Der grau schattierte Bereich stellt dabei den energetisch verbotenen Bereich nach Gleichung 6.4 dar. Sowohl für positive wie auch negative LL folgt die FWHM weitgehend der Grenzenergie der Unschärferelation. Hierbei ist vorweggenommen, dass sich die Fermi-Geschwindigkeiten v_F für Elektronen- und Loch-artige Zustände des Dirac-Kegels, wie im folgenden Kapitel diskutiert, leicht unterscheiden. Diese Abweichung stützt in Kombination mit den Messwerten zusätzlich den Zusammenhang zwischen FWHM und Fermi-Geschwindigkeit. Die größere Varianz einzelner Messpunkte für negative LL kann durch die Unsicherheit im Fit-Prozess erklärt werden, da die Ausprägung negativer LL in der Messung mitunter nur sehr gering war (vgl. Abbildung 6.2).

Da dieser Effekt grundsätzlich für die Oberflächenzustände aller TI gelten muss, wurden zur Absicherung der Ergebnisse Messungen auf Bi_2Te_3 und Bi_2Se_3 unter gleichen Bedingungen bezüglich Temperatur und Magnetfeld durchgeführt. Im

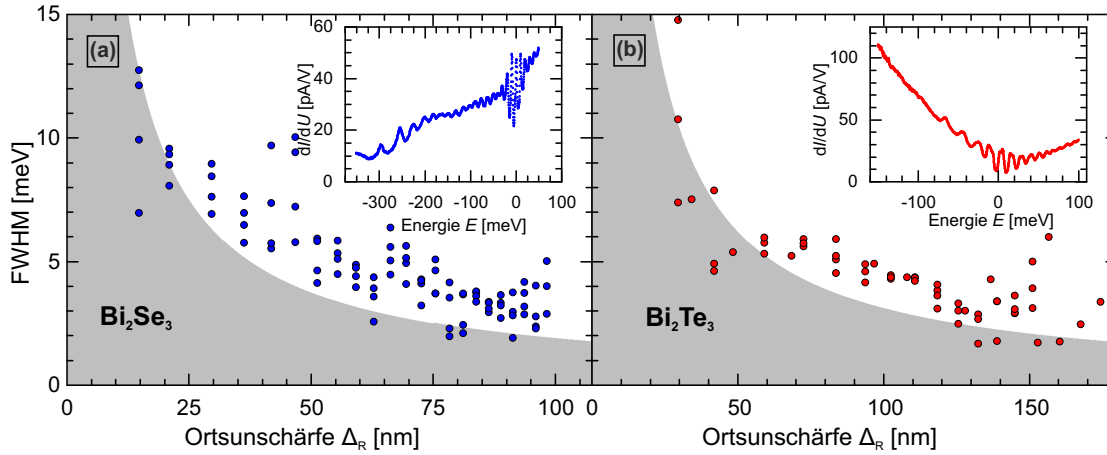


Abbildung 6.7: Vergleichsmessungen auf Bi_2Se_3 und Bi_2Te_3 . Die Auftragung der Datenpunkte wie auch des verbotenen Bereichs ist analog zu Abbildung 6.6. Die spektroskopischen Parameter sind im Fall von Bi_2Se_3 (a) $U_{SP} = -350$ mV, $I_{SP} = 500$ pA, $U_{mod} = 2$ mV und im Fall von Bi_2Te_3 (b) $U_{SP} = 100$ mV, $I_{SP} = 200$ pA, $U_{mod} = 1$ mV. Das Verhalten der FWHM der LL deckt sich dabei weitgehend mit dem auf Sb_2Te_3 beobachteten Verhalten. Die Insets zeigen jeweils eine exemplarische Spektroskopiekurve auf dem jeweiligen Material.

Gegensatz zu Sb_2Te_3 sind in diesen Materialien jedoch nur positive LL sichtbar (vgl. [93, 94]), weshalb eine Symmetrie der FWHM zum Dirac-Punkt auf diesen Materialien nicht nachgewiesen werden kann. Die FWHM der Messungen auf Bi_2Se_3 ist in Abbildung 6.7(a), die Messwerte von Bi_2Te_3 in (b) dargestellt. Dabei wird deutlich, dass der Trend bei allen drei topologischen Isolatoren auftritt, wobei die Ausprägung bei Bi_2Te_3 und Bi_2Se_3 nicht so klar wie im Fall von Sb_2Te_3 ist.

Da es sich bei dieser These um eine generelle Eigenschaft der Messung Dirac-artiger Systeme handelt, wurden zusätzlich zu den eigenen Messungen, zahlreiche Veröffentlichungen über Landau-Level-Spektroskopie auf topologischen Isolatoren, wie auch Graphen, qualitativ auf Übereinstimmung überprüft. Die Ergebnisse dieser Überprüfung sind in Tabelle 6.1 aufgeführt. Dabei zeigt sich, dass die auf topologischen Isolatoren gemessenen Breiten der Landau-Resonanzen weitgehend in guter Übereinstimmung mit den auf Basis der Unschärfe erwarteten Werten liegen. Eine Ausnahme bildet hierbei die Veröffentlichung von Hanaguri *et al.* [94], wobei die Breite der relevanten LL in den gezeigten Spektroskopiekurven größer zu sein scheint als die jeweilig dargestellten FWHM-Werte. Auf Graphen hingegen liegen nahezu alle gemessenen Werte unterhalb der durch die in Gleichung 6.4 berechneten unteren Grenze. Damit scheint die Herleitung der Energieunschärfe durch die Ort-Impuls-Unbestimmtheit zumindest auf Graphen nicht zu gelten und bedarf einer weiteren Überprüfung.

6 STM-Messungen auf Antimon-Tellurid Sb_2Te_3

Veröffentlichung	Material	B [T]	FWHM LL ₀ [meV]	FWHM LL ₁ [meV]
Pauly [22]	Sb_2Te_3	6	10 (8)	16 (5,5)
Jiang [82]	Sb_2Te_3	7	7,5 (7,7)	4,5 (4,5)
Fu [61]	Bi_2Se_3	11	> 6 (7,2)	? (5,1)
Cheng [95]	Bi_2Se_3	11	10,9 (7,2)	11,8 (5,1)
Okada [93]	Bi_2Te_3	7	10,8 (8,0)	8,4 (5,6)
Hanaguri [94]	Bi_2Se_3	11	6,0 (7,2)	6,0 (5,1)
Li [86]	Graphen	4	< 5 (10,1)	4,5 (7,2)
Yin [96]	Graphen	8	14,2 (22,0)	16,6 (15,5)
Miller [97]	Graphen	5	4,7 (15,4)	7,8 (10,9)

Tabelle 6.1: Vergleich der FWHM veröffentlichter Landau-Level-Spektroskopien mit Erwartungen bezüglich der Unschärferelation. Die Werte entsprechen hierbei den gemessenen Werten und die Werte in Klammern dem unteren Grenzwert nach Gleichung 6.4. Die Farbkodierung gibt Aufschluss über die Abweichung und ist unterteilt in Grün (Übereinstimmung), Blau (Messwert über Grenzwert), Orange (Wert leicht unter Grenzwert) und Rot (Messwert weit unter Grenzwert).

Energieunschärfe durch limitierte Lebenszeit aufgrund der Spin-Impuls-Kopplung

Aufgrund der Abweichungen im prognostizierten Verhalten auf Graphen soll hier ein zweiter hypothetischer Erklärungsansatz vorgestellt werden. Wie in Kapitel 5.1 diskutiert geht die semi-klassische Interpretation von Landau-Zuständen davon aus, dass Elektronen durch die Lorentzkraft auf Kreisbahnen gezwungen werden. Damit ist die Wellenfunktion eines Landau-Niveaus, ähnlich wie im Fall elektrostatischer Potentiale, lokal gebunden. Dies steht jedoch im Widerspruch zu der in Kapitel 5.2.3 diskutierten Eigenschaft eines topologischen Isolators, welches eine Lokalisierung der Wellenfunktion durch die TR-Symmetrie verbietet. Dabei ist zwar die TR-Symmetrie durch das externe Magnetfeld explizit gebrochen, vergleicht man jedoch die Energie der Spin-Impuls-Kopplung mit der Zeeman-Energie durch das externe Magnetfeld, so lässt sich vermuten, dass die Ausrichtung des Spins für die im Experiment angelegten Magnetfelder trotzdem weitgehend in der Ebene orientiert ist. Damit würde aber weiterhin die verbotene Lokalisierung gelten und der verbundene Widerspruch würde sich nur auflösen lassen, wenn man fordert, dass der Zustand zerfallen muss, bevor er destruktiv interferiert. Damit lässt sich eine maximale Lebensdauer Δ_t berechnen, die aufgrund der Unschärferelation zwischen Energie und Lebenszeit eines Zustands wiederum zu einer energetischen Verbreiterung Δ_E führt [90]:

$$\Delta_E \Delta_t \geq \hbar. \quad (6.5)$$

Durch die Spin-Impuls-Kopplung innerhalb eines topologischen Isolators lässt sich die Änderung des Spins durch die Änderung des Impulsvektors ausdrücken. Somit dreht sich der Spin innerhalb eines kompletten Umlaufs einer Zyklotronbahn um 360° . Die Zeit, die der Spin für diese Drehung benötigt, lässt sich auf Basis des Zyklotronradius Δ_x und der Fermi-Geschwindigkeit v_F berechnen und ergibt:

$$\Delta_t = \frac{2\pi\Delta_x}{v_F}. \quad (6.6)$$

Kombiniert man diese Gleichungen mit Gleichung 6.5, so ergibt sich für die Energieunschärfe:

$$\Delta_E \geq \frac{\hbar v_F}{\alpha 2\pi\Delta_x}. \quad (6.7)$$

α repräsentiert hierbei die relative Winkeländerung des Spins, wobei $\alpha = 1$ einer Drehung um 360° oder 2π entspricht, und dient einer späteren Anpassung an die Messdaten. Vergleicht man dieses Ergebnis mit der Energieunschärfe durch die Energie-Ort-Unbestimmtheit (Gleichung 6.4), so sind beide Gleichungen in allen Tendenzen identisch und unterscheiden sich lediglich im Vorfaktor. Eine quantitative Übereinstimmung mit den Messdaten (Abbildung 6.6) fordert dabei, dass die mittlere Winkeländerung des Spins, bevor der Zustand zerfällt $\alpha \approx 1/3 \equiv 120^\circ$ beträgt. Geht man ohne Einschränkung davon aus, dass die Spin-Komponente bei Eintritt in die Zyklotronbahn in x -Richtung orientiert ist, so liegt diese Änderung innerhalb des erwartbaren Bereichs zwischen $\alpha = 1/4 \equiv 90^\circ$, also senkrechter Orientierung zur ursprünglichen Richtung, und $\alpha = 1/2 \equiv 180^\circ$, in der sich die Richtung des Spins invertiert. Da es sich hierbei jedoch nur um eine anschauliche Begründung handelt, muss die hier vorgeschlagene Interpretation zusätzlich theoretisch auf ihre Verträglichkeit mit der Quantenmechanik von Landau-Zuständen auf topologischen Materialien und der Energie-Zeit-Unschärferelation überprüft werden.

6.1.3 Analyse der räumlichen Variation einzelner LL

Neben der unterschiedlichen energetischen Breite einzelner Landau-Niveaus wurde, wie in Kapitel 6.1 kurz diskutiert, ebenfalls eine Verschiebung der Energie in Abhängigkeit der räumlichen Position beobachtet. Eine örtliche Variation der Energiedifferenz zwischen Energie des Dirac-Punktes E_D und der Fermi-Energie E_F wurde auf allen prototypischen TI [22, 61, 93] sowie Halbleitern mit niedriger effektiver Elektronenmasse wie InAs(110) [98] beobachtet. In den meisten Fällen kann der Ursprung dieser Variation durch die Dichte an ionisierten Defekten auf oder leicht unterhalb der Oberfläche [22, 61] erklärt werden. Diese Fehlstellen entziehen

dem elektronischen System Elektronen oder fügen welche hinzu und bewirken in erster Näherung eine Verschiebung der Fermi-Energie E_F innerhalb der Bandstruktur. Ein solche Verschiebung müsste jedoch prinzipiell für alle spektroskopischen Merkmale gleich sein, weshalb die bereits beschriebene Tendenz der Verschiebung in Abhängigkeit des Landau-Level-Index nicht allein durch eine Veränderung des lokalen Fermi-Niveaus erklärt werden kann. Da ein Zusammenhang der beobachteten Effekte jedoch naheliegend scheint, wurde die Differenz zwischen Fermi- und Dirac-Energie großflächig bestimmt. Dazu wurde für die gesamte Region, in der Spektroskopien aufgenommen wurden, E_D mithilfe einer Grid-Spektroskopie bei 12 T kartographiert. Die Grid umfasste dabei 100×100 Punkte auf einem Areal von $200 \times 200 \text{ nm}^2$ in einem Energieintervall von 160 mV bis 210 mV. Das Energieintervall setzt sich hierbei aus den Extremwerten der Dirac-Energie für Spektroskopien an zufällig ausgewählten Punkten und einem für den Fit notwendigen Spielraum für den Anstieg und Abfall der Gauss-Resonanz zusammen. Die resultierende laterale Punktdichte liegt bei $1/4 \text{ nm}^2$, womit lokale Einflüsse wie Abweichungen durch die unmittelbare Nähe von Oberflächendefekten statistisch weitgehend eliminiert werden können. In allen 10000 Spektren wurde die nullte Landau-Resonanz automatisch mit einer Gauss-Funktion gefittet und das Maximum der jeweiligen Positionen bestimmt. Die resultierende Karte des Dirac-Punkts ist in Abbildung 6.8(a) dargestellt. Dabei sind deutlich großflächige Variationen von E_D im Bereich von 10-15 meV ersichtlich. Die einzelnen Unregelmäßigkeiten in Form von kleinen roten und schwarzen Bereichen entsprechen hierbei Punkten oder Regionen, in denen der Fit-Algorithmus keine klare Resonanz ausmachen konnte und werden deshalb in der Auswertung der Ergebnisse vernachlässigt.

Die weißen Kreise markieren die räumliche Position der besagten 11 Spektroskopiepunkte, für die ein volles Spektrum über den Energiebereich aller erwartbaren LL vorgenommen wurde. Eine Aufspaltung einzelner LL im Bereich hoher Potentialgradienten, wie von Fu *et al.* [61] diskutiert, kann dabei nicht festgestellt werden, wobei die totale Potentialdifferenz in unserer Messung auch weitaus niedriger ist. Die Energiewerte der einzelnen Landau-Niveaus an diesen 11 Punkten sind in Abbildung 6.8(b) dargestellt. Zur besseren Übersicht sind dabei die Energiewerte der einzelnen Position energetisch um 20 mV verschoben und die Farbkodierung entspricht der Dirac-Energie aus (a). Jedes Spektrum zeigt die erwartete lineare Dispersion zwischen Energie und k -Vektor, jedoch offenbart eine genaue Auswertung leichte Unterschiede der Fermi-Geschwindigkeit für jede Position sowie für positive und negative Landau-Level. Des Weiteren zeigt sich, dass in allen Messungen die Energie des nullten LL, respektive die Dirac-Energie, oberhalb des aus der Dispersion erwarteten Wertes liegt.

Ein möglicher Erklärungsansatz für diese Abweichung liegt in der Aufspaltung des Oberflächenzustands durch den Bruch der TR-Symmetrie durch das angelegte

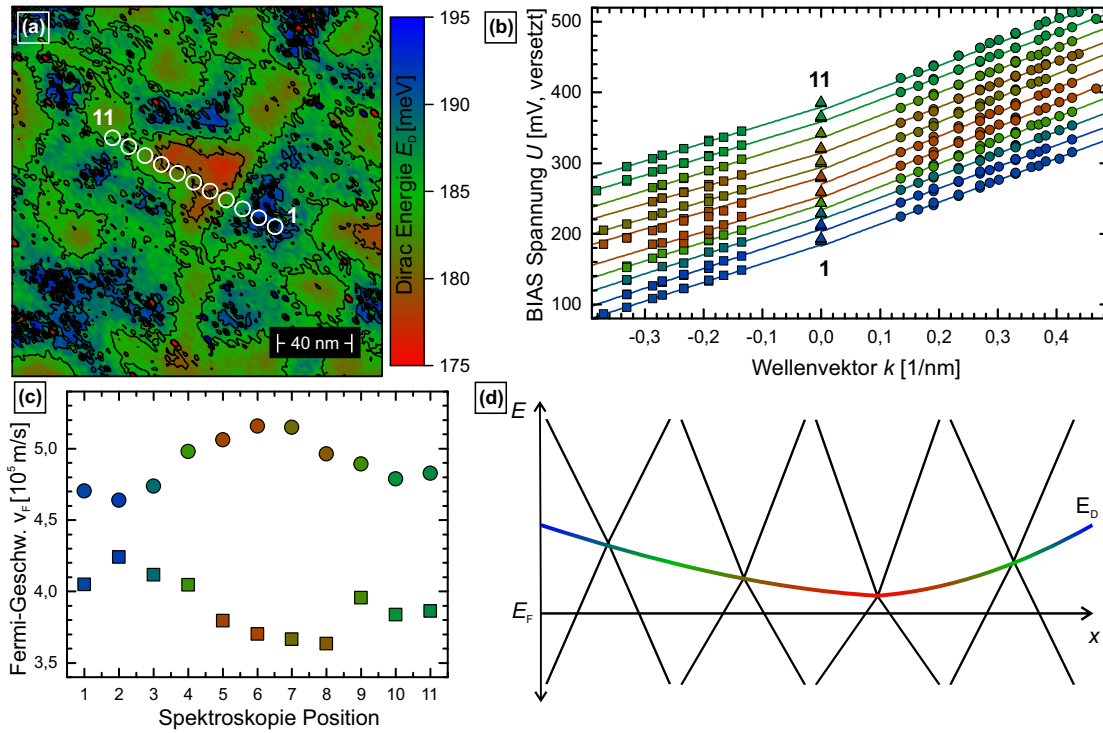


Abbildung 6.8: Lokale Unterschiede in der LL-Quantisierung. (a) Karte der Dirac-Energie bestimmt über das Maximum des nullten Landau-Niveaus sowie Position der folgenden Spektroskopien. (b) Dispersion von Sb_2Te_3 an den in (a) spezifizierten Positionen (versetzt aufgetragen). (c) Aus linearen Fits resultierende Fermi-Geschwindigkeit für die einzelnen Positionen getrennt für positive (Kreise) und negative (Quadrat) LL. (d) Schematische Darstellung des Dirac-Kegels abhängig von der Dirac-Energie.

Magnetfeld. Dieser Effekt wird zum Beispiel in der Interaktion von magnetischen Atomen mit topologischen Zuständen beobachtet und bewirkt eine Verschiebung des nullten LL zu höheren Energien (vgl. [99, 100]). Aus diesem Grund wurde das nullte LL für den Fit der Fermi-Geschwindigkeit vernachlässigt und ebenfalls v_F für positive und negative LL separat bestimmt. Die aus den Fits resultierenden Fermi-Geschwindigkeiten der einzelnen Positionen sind in Abbildung (c) dargestellt. Dabei werden zwei Abhängigkeiten deutlich:

- Je niedriger die Energie des Dirac-Punkts ist, desto größer ist die Differenz zwischen den Fermi-Geschwindigkeiten positiver und negativer LL.
- Im Rahmen der Messgenauigkeit sind die Abweichungen spiegel-symmetrisch zu einer virtuellen horizontalen Achse bei $v_F \approx 4.4 \cdot 10^5$ m/s.

Abbildung (d) zeigt eine schematische Darstellung des Dirac-Kegels in Abhängigkeit der Spektroskopie-Position. Dabei sind beide Effekte, die Variation des Dirac-

Punktes sowie die unterschiedlichen Fermi-Geschwindigkeiten berücksichtigt. Eine abschließende Interpretation der Eigenschaften konnte im Rahmen dieser Dissertation nicht gefunden werden. Aus diesem Grund sollen im Folgenden nur Interpretationsmöglichkeiten vorgestellt werden.

Als erste mögliche Ursache soll hier der Einfluss von Renormierungseffekten auf die Fermi-Geschwindigkeit diskutiert werden. Grundlage der Überlegung bilden die Veröffentlichungen von Bostwick *et al.* [101] und Chae *et al.* [102], die Variationen von v_F auf Graphen beobachteten und durch Renormierungseffekte erklären konnten. Aufgrund der Ähnlichkeit der physikalischen Eigenschaften von Oberflächenzuständen auf TI und Graphen lassen sich unter Einschränkung auf Graphen gewonnene Erkenntnisse auf TI übertragen. Nach Chae ergibt sich die Stärke der Renormierung auf Graphen dabei aus dem Einfluss von Vielteilchen-Wechselwirkungen und lässt sich mit folgender Gleichung approximieren:

$$\frac{v^*}{v} = 1 - \frac{r_S}{\pi} \left[\frac{5}{3} + \ln(r_S) \right] + \frac{r_S}{8} \ln\left(\frac{n_C}{n}\right).$$

Hierbei entspricht r_S einem Maß der Wechselwirkungsstärke, n der Ladungsträgerdichte, v^* und v der renormierten bzw. ursprünglichen Dirac-Geschwindigkeit und n_C einer Referenzladungsdichte. Unter der Voraussetzung, dass sich keiner dieser Parameter für den Elektronen- und Loch-artigen Anteil der Zustandsdichte ändert, führt dies jedoch nicht zu der beobachteten Symmetrie zwischen den Abweichungen der Dirac-Geschwindigkeiten unter und oberhalb der Dirac-Energie. Des Weiteren steht die Forderung nach Vielteilchen-Wechselwirkungen im Widerspruch zu der in Kapitel 6.1.2 gewonnen Erkenntnis, dass eben diese Wechselwirkungen keine tragende Rolle bei den Messungen spielen können.

Ein zweiter eher hypothetischer Erklärungsansatz wäre die lokale Generierung einer newtonschen Masse. Die grundsätzliche Idee hierbei ist, dass ein Bruch der Symmetrie zwischen den Dirac-Geschwindigkeiten ober- und unterhalb des Dirac-Punktes bei einer punktsymmetrischen Dispersion die Anwesenheit gerader Terme in der Hamiltonfunktion erfordert. In niedrigster Ordnung wäre dies ein Term proportional zu k^2 , analog zum Einfluss einer newtonschen Masse wie in Gleichung 5.7 für die Volumenzustände angenommen. Da Spin und Bahndrehimpuls für quadratische Terme unabhängige Variablen darstellen, ist allgemein nicht auszuschließen, dass der Spin dieser Komponente in σ_z -Richtung orientiert ist. Da die σ_z -Komponente jedoch an externe Magnetfelder koppelt, wäre die erste Konsequenz eine Aufspaltung des Dirac-Kegels wie im Fall magnetisch dotierter TI demonstriert (vgl. [99, 100]). Abbildung 6.9(a) zeigt die Position des nullten LL in Abhängigkeit des angelegten Magnetfelds für die einzelnen Spektroskopiepositionen. Unabhängig der Position ergibt sich mit zunehmendem Feld ein Trend zu höheren Energien, was mit der Öffnung einer Bandlücke an der Dirac-Energie

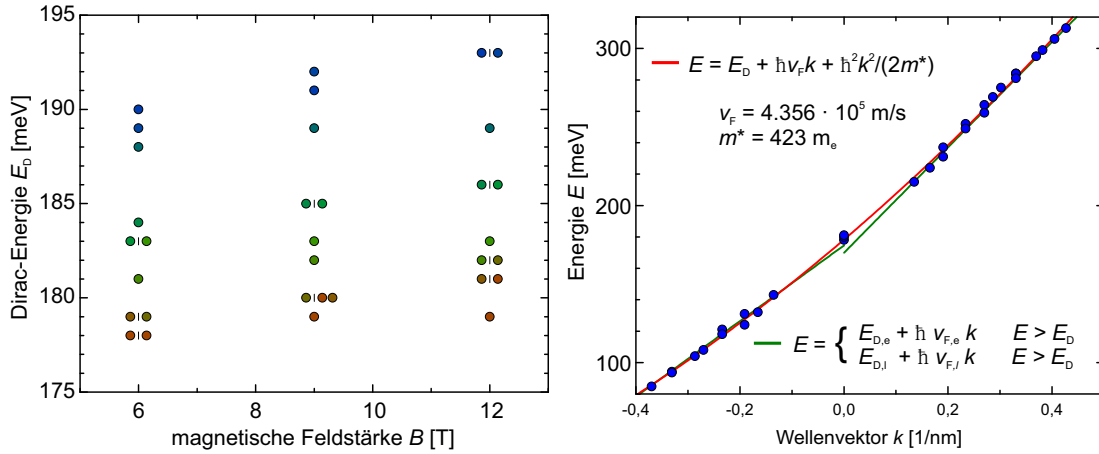


Abbildung 6.9: Magnetfeldabhängige Variation der Dirac-Energie und Abweichung innerhalb der Dispersion (a) Analyse des magnetfeldabhängigen Verhaltens des 0ten LL. Im Mittel steigt die Energie des 0ten LL für stärkere Magnetfelder, ein Effekt der ebenfalls in magnetisch dotierten TI beobachtet wird. (b) Linearer wie parabolischer Fit der Landau-Resonanzen an Spektroskopieposition 6 aus Abbildung 6.8. Der parabolische Fit repräsentiert die Energie des 0ten LL im Vergleich besser.

im Einklang steht. Wie ebenfalls zu erkennen, ist dieser Trend jedoch nicht für jede Position eindeutig, weshalb dies allenfalls als Indiz zu werten ist. Schaubild (b) zeigt die Energiepositionen der Landau-Resonanzen an Spektroskopieposition 6 aus Abbildung 6.8(a). Die Resonanzen sind dabei sowohl mit zwei linearen Fits wie auch einem parabolischen Fit genähert. Aufgrund der diskutierten Magnetfeldabhängigkeit wurde die Energie des nullten LL für die einzelnen Fits nicht berücksichtigt. Ein direkter Vergleich der Näherungen zeigt, dass die Energie des nullten LL in der parabolischen Dispersion besser getroffen wird. Jedoch zeigt sich ebenfalls, dass die Energie der ersten positiven LL systematisch unter der quadratisch genäherten Funktion liegen. Die Dirac-Geschwindigkeit beträgt wie in der Abbildung angegeben $v_F \approx 4.36 \cdot 10^5$ m/s und liegt damit näherungsweise an der diskutierten horizontalen Spiegelachse, welche die Fermi-Geschwindigkeiten positiver und negativer Resonanzen trennt.

Trotz der teilweise guten Übereinstimmung mit den Ergebnissen gestaltet sich die Suche der physikalischen Ursache für das Entstehen einer newtonschen Masse in den Oberflächenzuständen als problematisch. So steht die Vermutung im Widerspruch zu der in Kapitel 5.2.3 hergeleiteten Eigenschaft, dass der Hamiltonoperator von Randzuständen topologischer Isolatoren ohne Bruch der TR-Symmetrie, wie zum Beispiel durch ein externes Magnetfeld, nur ungerade Terme aufweisen darf. Jedoch fordert die zugrundeliegende Dirac-Gleichung ebenfalls, dass die im Volumen entstehende Bandlücke durch eine reelle Masse energetisch symmetrisch ist. Dies bedeutet aber insbesondere, dass die resultierenden Massen für Teilchen im

Valenz- bzw. Leitungsband gleich sind und die Dirac-Energie symmetrisch zwischen Valenz- und Leitungsband liegt. Folglich wäre es denkbar, dass eine Asymmetrie in der Krümmung des Valenz- und Leitungsbandes das Entstehen einer newtonsche Masse des Oberflächenzustands bewirkt. Dies wäre im Einklang mit der lokalen Änderung von Elektronen- und Lochmassen unter Einfluss ionisierender Defekte. Eine quantitative Analyse eines solchen Effekts ist jedoch schwierig, da sich die Fermi-Energie in der gemessenen Sb_2Te_3 -Probe bereits im Valenzband befindet und somit eine Prognose der Bandkrümmung im Valenz- und Leitungsband basierend auf den Messungen nicht möglich ist. Des Weiteren ist eine Berechnung der effektiven Elektronenmassen auf Basis der Krümmung des Oberflächenzustands nicht zielführend. Dies liegt an der inversen Proportionalität zwischen Bandkrümmung und effektiver Masse, was für geringere Abweichungen vom linearen Verhalten eine höhere effektive Masse zur Folge hat. Zusammenfassend sind damit Hinweise auf das lokale Auftreten eines Beitrags quadratischer Terme zu der Dispersionsrelation der Oberflächenzustände aus den Messungen ersichtlich, die physikalischen Ursachen dessen jedoch unklar.

Eine dritte Möglichkeit für die Unterschiede der Dirac-Geschwindigkeiten unter- und oberhalb der Dirac-Energie ist der Einfluss lokaler Gitterverzerrungen durch Defekte. So wurde theoretisch vorausgesagt, dass in Graphen lokale Verzerrungen Eichfelder hervorrufen, die wie Magnetfelder der Stärke mehrerer Tesla wirken [103]. Inwiefern sich ein solcher Effekt auf die Dispersion der Oberflächenzustände von TI auswirkt, wird zur Zeit in Zusammenarbeit mit der Arbeitsgruppe von Francisco Guinea des Instituts für Materialwissenschaften Madrid (ICMM) untersucht.

7 Zusammenfassung und Ausblick

Die vorliegende Arbeit behandelt den Aufbau eines Rastertunnelmikroskops (STM) für Experimente bei tiefen Temperaturen und hohen magnetischen Feldern sowie Messungen der Eigenschaften topologisch geschützter Oberflächenzustände innerhalb starker Magnetfelder.

Da sich diese Arbeit daher mit zwei unabhängigen physikalischen Themen befasst, ist der Aufbau dieser Arbeit ebenfalls zweigeteilt.

Im ersten Teil wird auf das grundlegenden Messprinzip und auf die physikalischen Hintergründe der Rastertunnelmikroskopie eingegangen sowie die gängigen Messmethoden vorgestellt. Besonderes Augenmerk liegt hierbei auf denjenigen Anforderungen, die für die Konstruktion eines STM relevant sind.

Im folgenden Kapitel wird der Aufbau des Kryostaten und die Funktionsweise der Elemente zur Erzielung von Probertemperaturen bis 1.4 Kelvin und magnetischen Feldern bis 12.5 Tesla diskutiert. Des Weiteren wird auf die thermische und mechanische Anbindung des STM an den Kryostaten eingegangen und insbesondere die Komponenten zur Dämpfung mechanischer Schwingungen auf den Spitze-Probe-Abstand diskutiert. Darauf folgend wird das eigen konstruierte STM vorgestellt. Besonders werden die speziellen Bauteile bezüglich ihrer mechanischen und thermischen Eigenschaften analysiert. Abschließend wird die Leistungsfähigkeit des STM anhand spezieller Probensysteme demonstriert, wobei ebenfalls kurz auf die physikalischen Eigenschaften der entsprechenden Materialien eingegangen wird.

Der zweite Teil dieser Arbeit beschäftigt sich mit Magnetfeld-abhängigen Messungen auf Sb_2Te_3 , einem Material das zur relativ neu entdeckten Klasse der topologischen Isolatoren (TI) zählt. Da eine Auswertung der Messergebnisse ohne Kenntnis der speziellen Eigenschaften dieser Materialklasse nur schwer möglich ist, sind in Abschnitt 5 die theoretischen wie experimentellen Grundlagen dieses Materialsystems in Auszügen vorgestellt. Des Weiteren wird auf die Eigenschaften von Elektronen in magnetischen Felder sowohl konventioneller Systeme als auch topologischer Isolatoren getrennt eingegangen und Unterschiede herausgearbeitet. Abschnitt 6 beschäftigt sich mit eigenen Messungen auf Sb_2Te_3 . Dabei wurden innerhalb einer Messreihe mehrere physikalisch interessante Zusammenhänge gefunden. So konnte nachgewiesen werden, dass sich die energetische Breite einzelner

7 Zusammenfassung und Ausblick

Landau-Resonanzen nicht durch gängige Streumechanismen erklären lässt. Stattdessen ergibt sich ein Zusammenhang zwischen der energetischen Breite einzelner Zustände und der lateralen Ausdehnung des durch die Spitze messbaren Bereichs der Probe, wie vom Heisenbergschen Prinzip der Unbestimmtheit von Ort und Impuls gefordert. Trotz guter Übereinstimmung mit veröffentlichten Messungen auf topologischen Isolatoren zeigen Messdaten auf Graphen eine Abweichung im prognostizierten Verhalten. Aus diesem Grund wird ebenfalls eine alternative Erklärung der Messergebnisse durch Lebenszeitbegrenzung in Spin-Bahn-gekoppelten Systemen vorgestellt.

Zusätzlich konnte in räumlich aufgelösten Messungen gezeigt werden, dass sich die Dirac-Geschwindigkeit des Oberflächenzustands abhängig vom lokalen Fermi-Niveau der Probe ändert. Insbesondere legen die Messergebnisse nahe, dass die Teilchen-Loch-Symmetrie des Oberflächenzustands durch lokale Potentialvariationen gebrochen ist. Da die genaue Ursache dieser Effekte mit Abschluss dieser Arbeit nicht restlos geklärt werden konnte, werden im letzten Teil mögliche Ursachen dieses Verhaltens diskutiert und sofern möglich mit Messergebnissen untermauert.

Allgemein bleiben die physikalischen Eigenschaften topologischer Isolatoren auch weiterhin ein spannendes Forschungsthema. Durch ihre speziellen Eigenschaften ermöglichen die Oberflächenzustände von TI einen tiefen Einblick in die Ursachen physikalischer Effekte. Insbesondere das Zusammenspiel der Spin-polarisierten Zustände mit magnetischen Feldern birgt das Potential neuer physikalischer Phänomene und bildet einen aktuellen Forschungsschwerpunkt der Festkörperphysik. Ein weiteres interessantes Thema könnte meiner Meinung nach das Verhalten dieser Landau Resonanzen an Randstrukturen wie Stufenkanten darstellen. So wäre es denkbar, dass sich in diesem Fall wie im Quanten-Hall-Effekt Randkanäle mit definierter Gruppengeschwindigkeit, aber auch definiertem Spin, entwickeln. Des Weiteren könnte sich ebenfalls die Zusammensetzung einzelner Landau Resonanzen in Abhängigkeit der Distanz zur Stufenkante ändern und Aufschluss über die grundlegenden Quantisierungseigenschaften dieser Zustände offenbaren.

Literatur

- [1] Leschke, Ingolf: "50 Jahre Moorsches Gesetz: "Jedes Jahr verdoppelt sich die CPU-Leistung"". (www.computerbild.de/artikel/cb-News-PC-Hardware-50-Jahre-Mooresches-Gesetz-Intel-Gordon-Moore-11580078.html, abgerufen am 19.02.2016) (Apr. 2015) (siehe S. 1).
- [2] Manhart, Klaus: "Grenzen der Prozessortechnik erreicht". (<http://www.pcmagazin.de/ratgeber/moore-law-report-ende-2020-1938131.html>, abgerufen am 19.02.2016) (Feb. 2014) (siehe S. 1).
- [3] Weishäupl, Sabine: "Quanteninterferenzeffekte in topologischen Isolatoren und magnetischen Halbleitern". Dissertation. Deutschland: Universität Regensburg (2015) (siehe S. 1).
- [4] Klitzing, K. v., Dorda, G. und Pepper, M.: "New Method for High-Accuracy Determination of the Fine-Structure Constant Based on Quantized Hall Resistance". *Phys. Rev. Lett.* **45**, 494–497. DOI: [10.1103/PhysRevLett.45.494](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.45.494) (Aug. 1980) (siehe S. 1, 43).
- [5] Klitzing, Klaus von: "Developments in the quantum Hall effect". *Philosophical Transactions of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* **363**.1834, 2203–2219. DOI: [10.1098/rsta.2005.1640](https://doi.org/10.1098/rsta.2005.1640) (2005) (siehe S. 1, 44).
- [6] Hasan, M. Z. und Kane, C. L.: "*Colloquium* : Topological insulators". *Rev. Mod. Phys.* **82**, 3045–3067. DOI: [10.1103/RevModPhys.82.3045](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.82.3045) (Nov. 2010) (siehe S. 1, 43–47, 50, 54, 55).
- [7] Qi, Xiao-Liang und Zhang, Shou-Cheng: "Topological insulators and superconductors". *Rev. Mod. Phys.* **83**, 1057–1110. DOI: [10.1103/RevModPhys.83.1057](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.83.1057) (Okt. 2011) (siehe S. 1, 43, 46–48, 50).
- [8] Fu, Liang und Kane, C. L.: "Superconducting Proximity Effect and Majorana Fermions at the Surface of a Topological Insulator". *Phys. Rev. Lett.* **100**, 096407. DOI: [10.1103/PhysRevLett.100.096407](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.100.096407) (März 2008) (siehe S. 1).

Literatur

- [9] Qi, Xiao-Liang, Li, Rundong, Zang, Jiadong et al.: “Inducing a Magnetic Monopole with Topological Surface States”. *Science* **323**.5918, 1184–1187. DOI: [10.1126/science.1167747](https://doi.org/10.1126/science.1167747). eprint: <http://science.sciencemag.org/content/323/5918/1184.full.pdf> (2009) (siehe S. 1).
- [10] Binnig, G., Rohrer, H., Gerber, Ch. et al.: “Tunneling through a controllable vacuum gap”. *Applied Physics Letters* **40**.2, 178–180. DOI: [10.1063/1.92999](https://doi.org/10.1063/1.92999) (1982) (siehe S. 3).
- [11] Binnig, G., Rohrer, H., Gerber, C. et al.: “ 7×7 Reconstruction on Si(111) Resolved in Real Space”. *Phys. Rev. Lett.* **50**, 120. DOI: [10.1103/PhysRevLett.50.120](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.50.120) (1983) (siehe S. 3).
- [12] Wiesendanger, R: *Scanning probe microscopy and spectroscopy : methods and applications*. Cambridge England New York: Cambridge University Press (1994) (siehe S. 5, 6, 13, 26).
- [13] Nolting, Wolfgang: *Grundkurs Theoretische Physik 5/1 Quantenmechanik - Grundlagen*. Springer Berlin Heidelberg (2009) (siehe S. 4, 14).
- [14] Nolting, Wolfgang: *Grundkurs Theoretische Physik 5/2 Quantenmechanik - Methoden und Anwendungen*. Springer Berlin Heidelberg (2012) (siehe S. 5).
- [15] Ternes, Markus: “Scanning tunneling spectroscopy at the single atom scale”. eng. Diss. Lausanne: SB (2006). DOI: [10.5075/epfl-thesis-3465](https://doi.org/10.5075/epfl-thesis-3465) (siehe S. 6, 13).
- [16] Heinze, Stefan: “First-Principles Theory of Scanning Tunneling Microscopy Applied to Transition-Metal Surfaces”. Dissertation. Deutschland: Universität Hamburg (2000) (siehe S. 6, 7).
- [17] Tersoff, J. und Hamann, D. R.: “Theory of the scanning tunneling microscope”. *Phys. Rev. B* **31**, 805–813. DOI: [10.1103/PhysRevB.31.805](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.31.805) (Jan. 1985) (siehe S. 6–8).
- [18] Chen, C. Julian: “Origin of atomic resolution on metal surfaces in scanning tunneling microscopy”. *Phys. Rev. Lett.* **65**, 448–451. DOI: [10.1103/PhysRevLett.65.448](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.65.448) (Juli 1990) (siehe S. 7, 9).
- [19] Bardeen, J.: “Tunnelling from a Many-Particle Point of View”. *Phys. Rev. Lett.* **6**, 57–59. DOI: [10.1103/PhysRevLett.6.57](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.6.57) (Jan. 1961) (siehe S. 6, 7).
- [20] Ibach, Harald und Lüth, Hans: *Festkörperphysik : Einführung in die Grundlagen*. Berlin u.a: Springer (2002) (siehe S. 9, 15, 43).

- [21] Michaelis, Christian H.: “Local electronic properties of individual nanostructures on the boron nitride nanomesh”. Dissertation. Deutschland: Universität Konstanz (2009) (siehe S. 10, 14, 39).
- [22] Pauly, C., Saunus, C., Liebmann, M. et al.: “Spatially resolved Landau level spectroscopy of the topological Dirac cone of bulk-type $\text{Sb}_2\text{Te}_3(0001)$: Potential fluctuations and quasiparticle lifetime”. *Phys. Rev. B* **92**, 085140. DOI: [10.1103/PhysRevB.92.085140](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.92.085140) (Aug. 2015) (siehe S. 14, 59–61, 64, 66, 72, 73).
- [23] El-Kareh, Lydia: “Rashba-type spin-split surface states: Heavy post transition metals on Ag(111)”. Dissertation. Deutschland: Universität Würzburg (Dez 2014) (siehe S. 14, 35, 36).
- [24] Crommie, M. F., Lutz, C. P. und Eigler, D. M.: “Imaging standing waves in a two-dimensional electron gas”. *Nature* **363**, 524–527. DOI: [10.1038/363524a0](https://doi.org/10.1038/363524a0) (1993) (siehe S. 14).
- [25] Grothe, S., Johnston, S., Chi, Shun et al.: “Quantifying Many-Body Effects by High-Resolution Fourier Transform Scanning Tunneling Spectroscopy”. *Phys. Rev. Lett.* **111**, 246804. DOI: [10.1103/PhysRevLett.111.246804](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.111.246804) (Dez. 2013) (siehe S. 15).
- [26] Reinert, F., Nicolay, G., Schmidt, S. et al.: “Direct measurements of the L -gap surface states on the (111) face of noble metals by photoelectron spectroscopy”. *Phys. Rev. B* **63**, 115415. DOI: [10.1103/PhysRevB.63.115415](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.63.115415) (März 2001) (siehe S. 15).
- [27] Cryovac[®]: *Heuserweg 14, D-53842 Troisdorf* (siehe S. 17).
- [28] Demtröder, Wolfgang: *Experimentalphysik 1, Mechanik und Wärme*. Berlin u.a.: Springer (2002) (siehe S. 18).
- [29] David R. Lide, ed.: *CRC Handbook of Chemistry and Physics*. Internet Version 2005. CRC Press, Boca Raton, FL (2005) (siehe S. 18, 26, 37).
- [30] Grob, Laura: “Development and Characterization of a 1K-Scanning Tunneling Microscope with a 12.5 T Magnet”. Diplomarbeit. Deutschland: Universität Würzburg (März 2014) (siehe S. 18).
- [31] Enss, Christian und Hunklinger, Siegfried: *Tieftemperaturphysik*. Berlin New York: Springer (2000) (siehe S. 18).
- [32] Cryomagnetics[®]: *KnowledgeBase/Basics of Superconducting Magnets*. online. abgerufen am 15.10.2015 (siehe S. 19).
- [33] Cryomagnetics[®]: *Herstellerangaben* (siehe S. 19).
- [34] Haarländer: *Regensburger Ring 14, D-91154 Roth* (siehe S. 21).

Literatur

- [35] Chen, C. J.: *Introduction to scanning tunneling microscopy*. Oxford University Press (2008) (siehe S. 23, 25).
- [36] Kuk, Y. und Silverman, P. J.: “Scanning tunneling microscope instrumentation”. *Review of Scientific Instruments* **60**.2, 165–180. DOI: [10.1063/1.1140457](https://doi.org/10.1063/1.1140457) (1989) (siehe S. 23).
- [37] Newport®: *Produktkatalog - S-2000 Stabilizer*. online. abgerufen am 09.12.2015 (siehe S. 25).
- [38] White, S. C., Singh, U. R. und Wahl, P.: “A stiff scanning tunneling microscopy head for measurement at low temperatures and in high magnetic fields”. *Review of Scientific Instruments* **82**.11, 113708. DOI: [10.1063/1.3663611](https://doi.org/10.1063/1.3663611) (2011) (siehe S. 26, 27, 35).
- [39] Van Degrift, Craig T.: “Coin silver as a construction material in low-temperature experiments”. *Physica B+C* **107**.1–3, 605–606. DOI: [10.1016/0378-4363\(81\)90605-7](https://doi.org/10.1016/0378-4363(81)90605-7) (1981) (siehe S. 26).
- [40] SolidWorks®: *Material Datenbank*. Version 2011 (siehe S. 26).
- [41] Lawless, W.D.: “Dielectric and thermal properties of a machinable glass—ceramic at low temperatures”. *Cryogenics* **15**.5, 273–277. DOI: [10.1016/0011-2275\(75\)90117-4](https://doi.org/10.1016/0011-2275(75)90117-4) (1975) (siehe S. 26).
- [42] Pan, S. H., Hudson, E. W. und Davis, J. C.: “³He refrigerator based very low temperature scanning tunneling microscope”. *Review of Scientific Instruments* **70**.2, 1459–1463. DOI: [10.1063/1.1149605](https://doi.org/10.1063/1.1149605) (1999) (siehe S. 26).
- [43] Wiebe, J., Wachowiak, A., Meier, F. et al.: “A 300 mK ultra-high vacuum scanning tunneling microscope for spin-resolved spectroscopy at high energy resolution”. *Review of Scientific Instruments* **75**.11, 4871–4879. DOI: [10.1063/1.1794431](https://doi.org/10.1063/1.1794431) (2004) (siehe S. 26, 38, 39).
- [44] Misra, S., Zhou, B. B., Drozdov, I. K. et al.: “Design and performance of an ultra-high vacuum scanning tunneling microscope operating at dilution refrigerator temperatures and high magnetic fields”. *Review of Scientific Instruments* **84**.10, 103903. DOI: [10.1063/1.4822271](https://doi.org/10.1063/1.4822271) (2013) (siehe S. 26, 27).
- [45] Song, Young Jae, Otte, Alexander F., Shvarts, Vladimir et al.: “Invited Review Article: A 10 mK scanning probe microscopy facility”. *Review of Scientific Instruments* **81**.12, 121101. DOI: [10.1063/1.3520482](https://doi.org/10.1063/1.3520482) (2010) (siehe S. 26, 27).

- [46] Zhang, L., Miyamachi, T., Tomanic, T. et al.: “A compact sub-Kelvin ultrahigh vacuum scanning tunneling microscope with high energy resolution and high stability”. *Review of Scientific Instruments* **82**.10, 103702. DOI: [10.1063/1.3646468](https://doi.org/10.1063/1.3646468) (2011) (siehe S. 26).
- [47] Li, Quanfeng, Wang, Qi, Hou, Yubin et al.: “18/20 T high magnetic field scanning tunneling microscope with fully low voltage operability, high current resolution, and large scale searching ability”. *Review of Scientific Instruments* **83**.4, 043706. DOI: [10.1063/1.3703568](https://doi.org/10.1063/1.3703568) (2012) (siehe S. 26).
- [48] Fein, A. P., Kirtley, J. R. und Feenstra, R. M.: “Scanning tunneling microscope for low temperature, high magnetic field, and spatially resolved spectroscopy”. *Review of Scientific Instruments* **58**.10, 1806–1810. DOI: [10.1063/1.1139524](https://doi.org/10.1063/1.1139524) (1987) (siehe S. 26).
- [49] Pan, S. H.: *International Patent Publication Number WO 93/19494*. 1993 (siehe S. 28).
- [50] Kügel, Jens: “Entwicklung und Charakterisierung eines Rastertunnelmikroskops mit optischem Zugang”. Diplomarbeit. Deutschland: Universität Würzburg (Sep. 2011) (siehe S. 28, 29, 32).
- [51] Ast, Christian R., Assig, Maximilian, Ast, Alexandra et al.: “Design criteria for scanning tunneling microscopes to reduce the response to external mechanical disturbances”. *Review of Scientific Instruments* **79**.9, 093704. DOI: [10.1063/1.2979008](https://doi.org/10.1063/1.2979008) (2008) (siehe S. 29).
- [52] Krammel, Christian: “Entwicklung, Aufbau und Charakterisierung eines Rastertunnelmikroskops”. Masterarbeit. Deutschland: Universität Würzburg (März 2013) (siehe S. 32).
- [53] SPECS®: *Voltastrasse 5, D-13355 Berlin* (siehe S. 33).
- [54] Hess, H. F., Robinson, R. B., Dynes, R. C. et al.: “Scanning-Tunneling-Microscope Observation of the Abrikosov Flux Lattice and the Density of States near and inside a Fluxoid”. *Phys. Rev. Lett.* **62**, 214–216. DOI: [10.1103/PhysRevLett.62.214](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.62.214) (Jan. 1989) (siehe S. 35, 38, 40).
- [55] Zhang, K. H. L., McLeod, I. M., Lu, Y. H. et al.: “Observation of a surface alloying-to-dealloying transition during growth of Bi on Ag(111)”. *Phys. Rev. B* **83**, 235418. DOI: [10.1103/PhysRevB.83.235418](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.83.235418) (Juni 2011) (siehe S. 36).
- [56] Kuttner, Thomas: “Verfahren und Beispiele zur Signalanalyse”. German. *Praxiswissen Schwingungsmesstechnik*. Springer Fachmedien Wiesbaden (2015), S. 263–335. DOI: [10.1007/978-3-658-04638-5_12](https://doi.org/10.1007/978-3-658-04638-5_12) (siehe S. 37).

Literatur

- [57] Hunklinger, Siegfried: “Supraleitung”. *Festkörperphysik*. Oldenbourg Wissenschaftsverlag (2011), S. 453–510. DOI: [10.1524/9783486711547](https://doi.org/10.1524/9783486711547) (siehe S. 39).
- [58] Gross, R. und Marx, A.: “Supraleitung”. *Festkörperphysik*. Oldenbourg Wissenschaftsverlag (2012), S. 753–906. DOI: [10.1524/9783486714869.753](https://doi.org/10.1524/9783486714869.753) (siehe S. 40).
- [59] Czyczoll, G.: *Theoretische Festkörperphysik*. Springer-Verlag (2008) (siehe S. 41–43).
- [60] Landau, Lev Davidovich und Lifshitz, EM: *Course of Theoretical Physics: Vol.: 3: Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory*. Pergamon Press (1965) (siehe S. 41, 42).
- [61] Fu, Y., Kawamura, M., Igarashi, K. et al.: “Imaging the two-component nature of Dirac-Landau levels in the topological surface state of Bi_2Se_3 ”. *Nature Physics* **10**, 815–819. DOI: [10.1038/NPHYS3084](https://doi.org/10.1038/NPHYS3084) (Sep. 2014) (siehe S. 42, 57, 72–74).
- [62] Chklovskii, D. B., Shklovskii, B. I. und Glazman, L. I.: “Electrostatics of edge channels”. *Phys. Rev. B* **46**, 4026–4034. DOI: [10.1103/PhysRevB.46.4026](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.46.4026) (Aug. 1992) (siehe S. 44).
- [63] Weitz, P, Ahlswede, E, Weis, J et al.: “Hall-potential investigations under quantum Hall conditions using scanning force microscopy”. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* **6**.1-4, 247–250. DOI: [10.1016/S1386-9477\(99\)00136-8](https://doi.org/10.1016/S1386-9477(99)00136-8) (2000) (siehe S. 44).
- [64] Thouless, D. J., Kohmoto, M., Nightingale, M. P. et al.: “Quantized Hall Conductance in a Two-Dimensional Periodic Potential”. *Phys. Rev. Lett.* **49**, 405–408. DOI: [10.1103/PhysRevLett.49.405](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.49.405) (Aug. 1982) (siehe S. 45).
- [65] Berry, M. V.: “Quantal Phase Factors Accompanying Adiabatic Changes”. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* **392**.1802, 45–57. DOI: [10.1098/rspa.1984.0023](https://doi.org/10.1098/rspa.1984.0023) (1984) (siehe S. 45).
- [66] Novoselov, K. S., Geim, A. K., Morozov, S. V. et al.: “Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films”. *Science* **306**.5696, 666–669. DOI: [10.1126/science.1102896](https://doi.org/10.1126/science.1102896). eprint: <http://science.sciencemag.org/content/306/5696/666.full.pdf> (2004) (siehe S. 46).
- [67] Novoselov, K. S., Geim, A. K., Morozov, S. V. et al.: “Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene”. *Nature* **438**, 197–200. DOI: [10.1038/nature04233](https://doi.org/10.1038/nature04233) (2005) (siehe S. 46, 47).

- [68] Castro Neto, A. H., Guinea, F., Peres, N. M. R. et al.: “The electronic properties of graphene”. *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109–162. DOI: [10.1103/RevModPhys.81.109](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.81.109) (Jan. 2009) (siehe S. 47).
- [69] Haldane, F. D. M.: “Model for a Quantum Hall Effect without Landau Levels: Condensed-Matter Realization of the ‘Parity Anomaly’”. *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2015–2018. DOI: [10.1103/PhysRevLett.61.2015](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.61.2015) (Okt. 1988) (siehe S. 47).
- [70] Shen, S.: *Topological insulators: Dirac equation in condensed matters*. Springer-Verlag (2012) (siehe S. 48, 49).
- [71] Fu, Liang und Kane, C. L.: “Time reversal polarization and a Z_2 adiabatic spin pump”. *Phys. Rev. B* **74**, 195312. DOI: [10.1103/PhysRevB.74.195312](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.74.195312) (Nov. 2006) (siehe S. 50, 51).
- [72] Fu, Liang und Kane, C. L.: “Topological insulators with inversion symmetry”. *Phys. Rev. B* **76**, 045302. DOI: [10.1103/PhysRevB.76.045302](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.76.045302) (Juli 2007) (siehe S. 50–54).
- [73] Fu, Liang, Kane, C. L. und Mele, E. J.: “Topological Insulators in Three Dimensions”. *Phys. Rev. Lett.* **98**, 106803. DOI: [10.1103/PhysRevLett.98.106803](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.98.106803) (März 2007) (siehe S. 50, 51).
- [74] Bernevig, B. Andrei, Hughes, Taylor L. und Zhang, Shou-Cheng: “Quantum Spin Hall Effect and Topological Phase Transition in HgTe Quantum Wells”. *Science* **314**, 5806, 1757–1761. DOI: [10.1126/science.1133734](https://doi.org/10.1126/science.1133734). eprint: <http://www.sciencemag.org/content/314/5806/1757.full.pdf> (2006) (siehe S. 53).
- [75] König, Markus, Wiedmann, Steffen, Brüne, Christoph et al.: “Quantum Spin Hall Insulator State in HgTe Quantum Wells”. *Science* **318**, 5851, 766–770. DOI: [10.1126/science.1148047](https://doi.org/10.1126/science.1148047). eprint: <http://www.sciencemag.org/content/318/5851/766.full.pdf> (2007) (siehe S. 54).
- [76] Zhang, H., X., Liu C., L., Qi X. et al.: “Topological insulators in Bi₂Se₃, Bi₂Te₃ and Sb₂Te₃ with a single Dirac cone on the surface”. *Nature Phys.* **5**, 438. DOI: [10.1038/nphys1270](https://doi.org/10.1038/nphys1270) (2009) (siehe S. 55, 56).
- [77] Teo, Jeffrey C. Y., Fu, Liang und Kane, C. L.: “Surface states and topological invariants in three-dimensional topological insulators: Application to Bi_{1-x}Sb_x”. *Phys. Rev. B* **78**, 045426. DOI: [10.1103/PhysRevB.78.045426](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.78.045426) (Juli 2008) (siehe S. 54).
- [78] Hsieh, D., Qian, D., Wray, L. et al.: “A topological Dirac insulator in a quantum spin Hall phase”. *Nature* **452**, 970. DOI: [10.1038/nature06843](https://doi.org/10.1038/nature06843) (2008) (siehe S. 54).

Literatur

- [79] Xia, Y., Qian, D., Hsieh, D. et al.: “Observation of a large-gap topological-insulator class with a single Dirac cone on the surface”. *Nature Phys.* **5**, 398. DOI: [10.1038/nphys1274](https://doi.org/10.1038/nphys1274) (2009) (siehe S. 55).
- [80] Hsieh, D, Xia, Y., Qian, D. et al.: “A tunable topological insulator in the spin helical Dirac transport regime”. *Nature* **460**, 1101–1105. DOI: [10.1038/nature08234](https://doi.org/10.1038/nature08234) (2009) (siehe S. 56).
- [81] Tkachov, G.: *Vorlesungsskript: Spinphysik der topologischen Quantenphänomene*. Universität Würzburg 2015/2016 (siehe S. 56).
- [82] Jiang, Yeping, Wang, Yilin, Chen, Mu et al.: “Landau Quantization and the Thickness Limit of Topological Insulator Thin Films of Sb_2Te_3 ”. *Phys. Rev. Lett.* **108**, 016401. DOI: [10.1103/PhysRevLett.108.016401](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.108.016401) (Jan. 2012) (siehe S. 59, 61, 64, 72).
- [83] Kokh, K. A., Makarenko, S. V., Golyashov, V. A. et al.: “Melt growth of bulk Bi_2Te_3 crystals with a natural p-n junction”. *CrystEngComm* **16**, 581–584 (2014) (siehe S. 59).
- [84] Bathon, Thomas: “Rastertunnelmikroskopie und -spektroskopie des binären Topologischen Isolators Bi_2Te_3 ”. Diplomarbeit. Deutschland: Universität Würzburg (Okt 2013) (siehe S. 59).
- [85] Park, S. R., Jung, W. S., Kim, Chul et al.: “Quasiparticle scattering and the protected nature of the topological states in a parent topological insulator Bi_2Se_3 ”. *Phys. Rev. B* **81**, 041405. DOI: [10.1103/PhysRevB.81.041405](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.81.041405) (Jan. 2010) (siehe S. 64).
- [86] Li, Guohong, Luican, Adina und Andrei, Eva Y.: “Scanning Tunneling Spectroscopy of Graphene on Graphite”. *Phys. Rev. Lett.* **102**, 176804. DOI: [10.1103/PhysRevLett.102.176804](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.102.176804) (Apr. 2009) (siehe S. 64, 72).
- [87] Gross, R. und Marx, A.: “Dynamik von Kristallelektronen”. *Festkörperphysik*. Oldenbourg Wissenschaftsverlag (2012), S. 381–479. DOI: [10.1524/9783486714869.381](https://doi.org/10.1524/9783486714869.381) (siehe S. 64, 65).
- [88] Echenique, P.M., Berndt, R., Chulkov, E.V. et al.: “Decay of electronic excitations at metal surfaces”. *Surface Science Reports* **52.7 - 8**, 219–317. DOI: [http://dx.doi.org/10.1016/j.surfrep.2004.02.002](https://doi.org/http://dx.doi.org/10.1016/j.surfrep.2004.02.002) (2004) (siehe S. 65).
- [89] Hunklinger, Siegfried: “Elektronische Transporteigenschaften”. *Festkörperphysik*. Oldenbourg Wissenschaftsverlag (2011), S. 320–388. DOI: [10.1524/9783486711547](https://doi.org/10.1524/9783486711547) (siehe S. 66).
- [90] Nolting, W.: *Grundkurs Theoretische Physik 5/1 Quantenmechanik - Grundlagen*. Springer Berlin Heidelberg (2002) (siehe S. 67, 72).

- [91] Morgenstern, M., Klijn, J., Meyer, Chr. et al.: “Real-Space Observation of Drift States in a Two-Dimensional Electron System at High Magnetic Fields”. *Phys. Rev. Lett.* **90**, 056804. DOI: [10.1103/PhysRevLett.90.056804](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.90.056804) (Feb. 2003) (siehe S. 68).
- [92] Hashimoto, K., Sohrmann, C., Wiebe, J. et al.: “Quantum Hall Transition in Real Space: From Localized to Extended States”. *Phys. Rev. Lett.* **101**, 256802. DOI: [10.1103/PhysRevLett.101.256802](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.101.256802) (Dez. 2008) (siehe S. 69).
- [93] Okada, Yoshinori, Zhou, Wenwen, Dhital, Chetan et al.: “Visualizing Landau Levels of Dirac Electrons in a One-Dimensional Potential”. *Phys. Rev. Lett.* **109**, 166407. DOI: [10.1103/PhysRevLett.109.166407](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.109.166407) (Okt. 2012) (siehe S. 71–73).
- [94] Hanaguri, T., Igarashi, K., Kawamura, M. et al.: “Momentum-resolved Landau-level spectroscopy of Dirac surface state in Bi_2Se_3 ”. *Phys. Rev. B* **82**, 081305. DOI: [10.1103/PhysRevB.82.081305](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.82.081305) (Aug. 2010) (siehe S. 71, 72).
- [95] Cheng, Peng, Song, Canli, Zhang, Tong et al.: “Landau Quantization of Topological Surface States in Bi_2Se_3 ”. *Phys. Rev. Lett.* **105**, 076801. DOI: [10.1103/PhysRevLett.105.076801](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.105.076801) (Aug. 2010) (siehe S. 72).
- [96] Yin, Long-Jing, Li, Si-Yu, Qiao, Jia-Bin et al.: “Landau quantization in graphene monolayer, Bernal bilayer, and Bernal trilayer on graphite surface”. *Phys. Rev. B* **91**, 115405. DOI: [10.1103/PhysRevB.91.115405](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.91.115405) (März 2015) (siehe S. 72).
- [97] Miller, David L., Kubista, Kevin D., Rutter, Gregory M. et al.: “Observing the Quantization of Zero Mass Carriers in Graphene”. *Science* **324**, 924–927. DOI: [10.1126/science.1171810](https://doi.org/10.1126/science.1171810). eprint: <http://science.sciencemag.org/content/324/5929/924.full.pdf> (2009) (siehe S. 72).
- [98] Morgenstern, M., Wittneven, Chr., Dombrowski, R. et al.: “Spatial Fluctuations of the Density of States in Magnetic Fields Observed with Scanning Tunneling Spectroscopy”. *Phys. Rev. Lett.* **84**, 5588–5591. DOI: [10.1103/PhysRevLett.84.5588](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.84.5588) (Juni 2000) (siehe S. 73).
- [99] Jiang, Yeping, Song, Canli, Li, Zhi et al.: “Mass acquisition of Dirac fermions in magnetically doped topological insulator Sb_2Te_3 films”. *Phys. Rev. B* **92**, 195418. DOI: [10.1103/PhysRevB.92.195418](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.92.195418) (Nov. 2015) (siehe S. 75, 76).
- [100] Xu, Su-Yang, Neupane, Madhab, Liu, Chang et al.: “Hedgehog spin texture and Berry’s phase tuning in a magnetic topological insulator”. *Nat Phys* **8**, 616–622. DOI: [10.1038/nphys2351](https://doi.org/10.1038/nphys2351) (Aug. 2012) (siehe S. 75, 76).

Literatur

- [101] Bostwick, Aaron, Ohta, Taisuke, Seyller, Thomas et al.: “Quasiparticle dynamics in graphene”. *Nature Physics* **3**, 36–40. DOI: [10.1038/nphys477](https://doi.org/10.1038/nphys477) (2007) (siehe S. 76).
- [102] Chae, Jungseok, Jung, Suyong, Young, Andrea F. et al.: “Renormalization of the Graphene Dispersion Velocity Determined from Scanning Tunneling Spectroscopy”. *Phys. Rev. Lett.* **109**, 116802. DOI: [10.1103/PhysRevLett.109.116802](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.109.116802) (Sep. 2012) (siehe S. 76).
- [103] Guinea, F, Katsnelson, MI und Geim, AK: “Energy gaps and a zero-field quantum Hall effect in graphene by strain engineering”. *Nature Physics* **6**, 30–33. DOI: [10.1038/nphys1420](https://doi.org/10.1038/nphys1420) (2010) (siehe S. 78).

Liste eigener Publikationen

- **Scattering properties of the three-dimensional topological insulator Sb_2Te_3 : Coexistence of topologically trivial and nontrivial surface states with opposite spin-momentum helicity**
P. Sessi, O. Storz, T. Bathon, S. Wilfert, K. A. Kokh, O. E. Tereshchenko, G. Bihlmayer und M. Bode
Phys. Rev. B **93**, 035110
- **Dual nature of magnetic dopants and competing trends in topological insulators**
P. Sessi, R. Biswas, T. Bathon, O. Storz, S. Wilfert, A. Barla, K. Kokh, O. Tereshchenko, K. Fauth, M. Bode und A. Balatsky
Nature Communications 12027 (2016)
- **Reaching Heisenberg's uncertainty limit of topological surface state lifetimes through Larmor squeezing**
O. Storz, P. Sessi, S. Wilfert, T. Bathon, K. A. Kokh, O. E. Tereshchenko und M. Bode
(in Bearbeitung)
- **Mapping the effect of defect-induced strain disorder on the Dirac states of topological insulators**
O. Storz, A. Cortijo, S. Wilfert, K. A. Kokh, O. E. Tereshchenko, M. A. H. Vozmediano, M. Bode, F. Guinea und P. Sessi
Phys. Rev. B **94**, 121301(R)

Danksagung

Zuletzt möchte ich mich bei allen Personen bedanken, ohne die der Abschluss dieser Arbeit nicht möglich gewesen wäre:

- **Prof. Dr. Matthias Bode** für das in mich gesetzte Vertrauen und die damit verbundene Möglichkeit, meine Dissertation innerhalb der Arbeitsgruppe Experimentelle Physik II anzufertigen. Ebenso danke ich für die zahllosen technischen wie fachlichen Ratschläge und konstruktiven Gesprächsrunden, die maßgeblich zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben.
- **Dr. Paolo Sessi** für die hervorragende Betreuung und die jederzeit positive Zusammenarbeit. Ohne die kritischen aber stets konstruktiven Diskussionen und seine Expertise über STM-Aufbau, Elektronik und allgemeine physikalische Zusammenhänge, insbesondere auch von topologischen Isolatoren, wäre diese Arbeit nicht möglich gewesen.
- **Stefan Wilfert, Laura Grob und Kathrin Schneider** für die stets tolle Zusammenarbeit und das hervorragende Arbeitsklima innerhalb des Labors, insbesondere auch in denjenigen Zeiten, in denen nicht alles so hervorragend lief.
- **Dr. Jens Kügel, Thomas Bathon, Andreas Krönlein, Jeanette Kemmer und Tobias Maurer** dafür, dass sie jederzeit ein offenes Ohr für physikalische wie technische Probleme meinerseits hatten und ebenso maßgeblich zu deren Lösung beigetragen haben. Besonders hervorzuheben ist hierbei Dr. Jens Kügel, in dessen Büro ich wahrscheinlich ebenso viel Zeit verbracht habe, wie in meinem eigenen.
- **Allen Mitarbeitern der wissenschaftlichen Werkstätten** für die hervorragende Zusammenarbeit und stetige Expertise in allen konstruktiven wie elektronischen Fragen. Besonderer Dank gilt hierbei Herrn Rainer Brauner und Herrn Günther Carl für die kritische Begutachtung vieler Konstruktionsvorschläge; Ohne sie würde vieles sicher nicht so funktionieren wie es soll.
- **Dr. Jens Kügel, Stefan Wilfert, Thomas Bathon und Melanie Holzbauer** für das Korrekturlesen dieser Arbeit und dem damit verbundenen Erkenntnisgewinn in richtiger Kommasetzung.

Literatur

- **Allen Mitgliedern der Arbeitsgruppe Experimentelle Physik II** für das hervorragende Arbeitsklima und die tolle Zusammenarbeit.
- **Prof. Dr. Friedrich Reinert** für die Bereitschaft zur Übernahme der Zweitkorrektur dieser Arbeit.
- **Meiner Familie und meiner Freundin Melanie** für die psychologische Unterstützung in Guten aber vor allem auch in schwierigen Zeiten während dieser Dissertation.