Leibniz Universität Hannover
Institut für Festkörperphysik
Abteilung Oberflächen
Prof. Dr. K. Morgenstern

Schnelle Rastertunnelmikroskopie: Entwicklung einer Echtzeitsteuerung und Dynamik heteroepitaktischer Cu-Inseln auf Ag(100)

Diplomarbeit
von
Christopher Zaum

August 2007

Leibniz Universität Hannover
Institut für Festkörperphysik
Abteilung Oberflächen
Prof. Dr. K. Morgenstern

Schnelle Rastertunnelmikroskopie: Entwicklung einer Echtzeitsteuerung und Dynamik heteroepitaktischer Cu-Inseln auf Ag(100)

Diplomarbeit
von
Christopher Zaum

Erstprüfer: Prof. Dr. rer. nat. K. Morgenstern
Zweitprüfer: Priv.-Doz. Dr. rer. nat. C. Tegenkamp

Ich versichere, dass ich die vorgelegte Arbeit selbstständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen, Hilfen und Hilfsmittel benutzt habe.

Hannover, den 21. August 2007

Christopher Zaum

Danksagung

Zuerst möchte ich mich bei Prof. Dr. K. Morgenstern bedanken, dass sie es mir ermöglichte, in ihrer Arbeitsgruppe diese Diplomarbeit durchführen zu können und für ihre gute Betreuung während dieser Zeit.

Natürlich gilt mein Dank auch allen anderen Mitgliedern der Arbeitsgruppen Morgenstern und Pfnür für die gute Arbeitsatmosphäre. Sie standen immer mit Rat und Tat zur Hilfe, wenn diese benötigt wurde.

Besonders möchte ich mich auch bei meinem Vater und dem Rest meiner Familie bedanken, ohne den mein Studium mit dieser Arbeit als Abschluss so nicht zustande gekommen wäre.

Christopher Zaum
August 2007

Inhaltsverzeichnis

1 Grundlagen der Tunnelmikroskopie **2**

1.1 Messprinzip des Rastertunnelmikroskops 2

1.2 Theorie des Tunnelprozesses 4

2 Anforderungen an die Echtzeitsteuerung **7**

2.1 Allgemeine Anforderungen 7

2.2 Projektspezifische Anforderungen 8

2.2.1 *SONOS* Projekt 8

2.2.2 Multiskalen-Tunnelmikroskop 9

2.2.3 Ausstattung von Schülerlaboren 9

2.3 Analyse einiger kommerzieller Systeme 10

2.3.1 Kontrollsystem *SPM-1000* von *RHK* 10

2.3.2 Kontrollsystem *SPM Controller* von *Nanonis* 10

2.3.3 Kontrollsystem *MATRIX* von *Omicron* 11

2.3.4 Kontrollsystem *SPM* von *Anfatec* 11

2.4 Schlussfolgerung 11

3 Hardware der Echtzeitsteuerung **12**

3.1 Aufbau der Kontrolleinheit 13

3.2 Echtzeitrechner *compactRIO* 16

3.3 Spannungsversorgungen 17

3.3.1 Niederspannungsnetzteile 18

3.3.2 Hochspannungsnetzteil 20
3.4 Hochspannungsverstärker 20
3.5 Schlussfolgerung 27

4 Software der Echtzeitsteuerung 28
4.1 Konzept der Software 29
4.2 Benutzeroberfläche 31
4.2.1 Kontrollfenster 31
4.2.2 Bildfenster 32
4.2.3 Zeilenfenster 34
4.2.4 *3D*-Fenster 34
4.3 Koordinatensysteme 36
4.4 Prozesse des Echtzeitrechners 36
4.4.1 Höhenregelung 38
4.4.2 Erzeugung der Scanrampen 40
4.4.3 Kontrolle der Grobannäherung 43
4.4.4 Erzeugung der statischen Ausgangsspannungen 47
4.5 Prozesse des *Host-PC* 47
4.5.1 Erfassung der Bildaten 48
4.5.1.1 Kippung der Scanzeilen entfernen 50
4.5.1.2 Einrücken der Scanzeilen 51
4.5.2 Anzeige und Verarbeitung der Bilddaten 52
4.6 Netzwerkkommunikation zwischen *Host-PC* und Echtzeitrechner . . 54
4.6.1 Transfer der Kontrolldaten 54
4.6.2 Transfer der Voreinstellungen 54
4.6.3 Transfer der Bilddaten 55
4.7 Schlussfolgerung 59

5 Anwendungen der Echtzeitsteuerung 60

5.1 *SONOS* Projekt 60

5.1.1 Aufbau des *SONOS* Mikroskops 61

5.1.2 Testmessungen mit dem *SONOS* Mikroskop 64

5.1.2.1 Goldterrassen 64

5.1.2.2 *HOPG* 65

5.2 Multiskalen-*STM* 68

5.3 Praktikums-*STM* für Schülerlabore 69

5.4 Schlussfolgerung 71

6 Rastertunnelmikroskop *STM 150 Aarhus* 72

6.1 Systembeschreibung 72

6.2 Änderungen am ursprünglichen Aufbau 74

6.2.1 Metallverdampfer 75

6.2.2 Probenheizung 76

6.3 Schlussfolgerung 76

7 Heteroepitaktische Cu-Inseln auf Ag(100) 77

7.1 Datenerfassung und -auswertung 77

7.2 Präparation des Systems 79

7.3 Struktur der Cu-Inseln 80

7.4 Diffusion der Cu-Inseln 85

7.5 Zerfall der Cu-Inseln 92

7.6 Schlussfolgerung 96

8 Zusammenfassung und Ausblick 97

Literaturverzeichnis 99

A Leistungsdaten der Echtzeitsteuerung 105

B Filme von Cu auf Ag(100) **106**

Einleitung

Die Entwicklung des Rastertunnelmikroskops durch Gerd Binnig und Heinrich Rohrer (siehe [Bin1982], [Roh1982] und [Bin1983]) hat die Oberflächenphysik revolutioniert. Kleinste Oberflächenstrukturen bis hinunter zu einzelnen Atomen können mit diesem Verfahren abgebildet und manipuliert werden. Ein in den letzten Jahren an Bedeutung gewinnender Bereich der Tunnelmikroskopie ist die Untersuchung der Dynamik von Nanostrukturen mit hoher Zeitauflösung (siehe [Mor1996] und [Ros2005]). Wachstum, Diffusion und Zerfall von Adatominseln aber auch das Wachstum und die Reaktionen ganzer Schichtsysteme können damit untersucht werden. Das Verständnis vieler technologisch wichtiger Verfahren, insbesondere das Verständnis der Katalyse beruht auf der Analyse der genannten Prozesse (siehe [Das2003]). Besonders Mischsysteme aus verschiedenen Materialien sind hier von Interesse. Neben der Konstruktion eines mechanischen Aufbaus hoher Stabilität und hoher mechanischer Resonanzfrequenz ist die Entwicklung eines hinreichend schnellen Steuersystems die größte technische Herausforderung der schnellen Tunnelmikroskopie.

In Kapitel 1 werden die Grundlagen eines Rastertunnelmikroskops erläutert und Kapitel 2 beschäftigt sich mit den Anforderungen an ein Steuersystem für Tunnelmikroskope mit hoher Zeitauflösung. Neben den allgemeinen Erfordernissen werden auch Aspekte spezieller Projekte diskutiert, für die das Kontrollsystem vorgesehen ist.

In Kapitel 3 und Kapitel 4 wird die Umsetzung des Anforderungskataloges in eine Steuerelektronik mit Steuersoftware beschrieben. Auch Testergebnisse der allgemeinen Leistungsfähigkeit werden diskutiert.

Kapitel 5 zeigt die Anpassung der entwickelten Elektronik an Tunnelmikroskope aus verschiedenen Anwendungsfeldern. Erfolgreiche Testmessungen werden ebenfalls präsentiert.

In Kapitel 7 werden die Präparation, die Struktur und die Dynamik von Kupfernanostrukturen auf einer Silberoberfläche diskutiert. Die Untersuchungen erfolgen mit einem in Kapitel 6 vorgestellten schnellen Tunnelmikroskop.

Kapitel 8 schließt die Arbeit mit einer Zusammenfassung der Ergebnisse und einem Ausblick auf folgende Projekte ab.

Kapitel 1

Grundlagen der Tunnelmikroskopie

Die Rastertunnelmikroskopie ist eine der neuesten Entwicklungen innerhalb der hochauflösenden Mikroskopie. Obwohl erst 1981 von den Physikern Gerd Binnig und Heinrich Rohrer entwickelt (Nobelpreis 1986, siehe [Bin1982], [Roh1982] und [Bin1983]), ist das Rastertunnelmikroskop (englisch: *Scanning Tunneling Microscope*, kurz *STM*) heute aus vielen Bereichen der Physik nicht mehr wegzudenken. Es ermöglicht die Untersuchung leitender Oberflächen auf atomarer Ebene im Realraum. Modifizierte Versionen sind außerdem in der Lage, Moleküle oder einzelne Atome direkt zu bewegen sowie das elektronische und phononische Spektrum der zu analysierenden Oberfläche zu bestimmen. Eine große Anzahl von Tunnelmikroskopen für die unterschiedlichsten Anwendungen in Industrie und Forschung sind heutzutage kommerziell verfügbar. Erweitert wird diese Palette noch durch verschiedenste Eigen- und Weiterentwicklungen von Forschungseinrichtungen und Universitäten. Es gibt sogar Projekte zum Einsatz von Rastertunnelmikroskopen im Schulunterricht (siehe [Pan2004] und [Zau2006]).

1.1 Messprinzip des Rastertunnelmikroskops

Wie alle Rastersondenmikroskope tastet das Rastertunnelmikroskop die zu untersuchende Oberfläche mithilfe einer Sonde punktweise ab. Diese Sonde besteht aus einer sehr scharfen und elektrisch leitenden Spitze. Im Idealfall besteht ihr Ende nur aus einem einzigen Atom oder einem kleinen Cluster von Atomen. Je feiner die Spitze ist, desto höher ist auch das Auflösungsvermögen des *STM*. Zwischen der ebenfalls leitenden Probe (aus einem Metall, einem Halbleiter oder einer dünnen Isolatorschicht über einem Leiter) und der Messspitze wird eine Vorspannung U_T angelegt. Diese liegt typischerweise im Bereich von einigen Millivolt bis Volt. Ist

die Spitze weit von der Probe entfernt, so fließt zwischen Spitze und Probe kein Strom. Wird die Spitze jedoch bis auf einige zehntel Nanometer an die Probe herangeführt, kommt es zu einem Elektronenfluss zwischen Spitze und Probe (siehe Abbildung 1.1). Durch den quantenmechanischen Tunneleffekt können einige Elektronen, die durch den fehlenden ohmschen Kontakt hervorgerufene Potentialbarriere zwischen Spitze und Probe überwinden (siehe Abschnitt 1.2). Die Stärke dieses Tunnelstroms I_T hängt exponentiell vom Abstand zwischen Tunnelspitze und Probe ab. Die erreichten Stromstärken liegen im Bereich einiger Pico- oder Nanoampere. Leistungsfähige Vorverstärkersysteme sind daher zur Messung des Tunnelstroms notwendig.

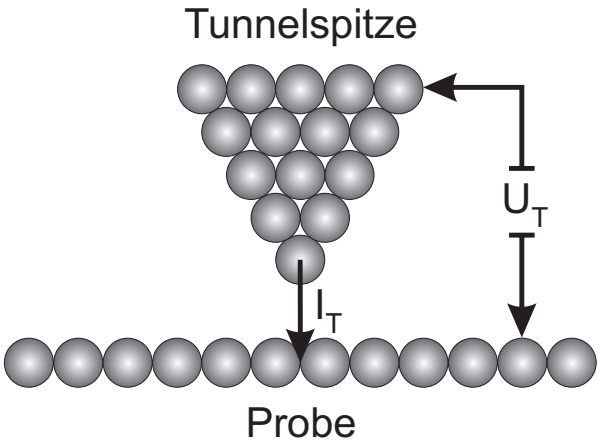


Abbildung 1.1: Schematische Darstellung von Tunnelspitze und Probe

Wird nun die Probenoberfläche zeilenweise von der Spitze abgetastet (englisch: *Scan*) und dabei der Abstand zwischen Messspitze und Oberfläche in der Art nachgestellt, dass der Tunnelstrom konstant bleibt, so entsprechen die Steuerbewegungen der Spitze dem Höhenprofil der Oberfläche. Diese Arbeitsweise trägt die Bezeichnung *Constant-Current-Mode*. Allerdings folgt die Spitze nur grob der Oberflächentopographie, da die elektronische Struktur der Probe den Tunnelstrom stark beeinflusst. Für reine Metalloberflächen mit uniformer elektronischer Struktur ist die Übereinstimmung mit dem geometrischen Höhenprofil jedoch recht gut. Es gibt auch noch eine andere Möglichkeit der Abtastung. Hierbei wird der Abstand der Spitze zur Oberfläche während des Scans nicht verändert. Lediglich die Tunnelstromänderung während der Abtastung wird aufgezeichnet und daraus ein Oberflächenbild gewonnen. Diese Arbeitsweise trägt die Bezeichnung *Constant-Height-Mode*. Das Abrastern der Probe mit der Messspitze geschieht meistens im Vakuum, um Oberflächenkontaminationen zu minimieren, ist aber auch unter Umgebungsdruck möglich.

Allgemeine Bestandteile eines Tunnelmikroskops sind ein Nanopositioniersystem für die extrem feinen Spitzenbewegungen, ein Vorverstärker zur Messung des Tunnelstroms sowie eine Steuerelektronik zur Regelung der Spitzenhöhe und Kontrolle

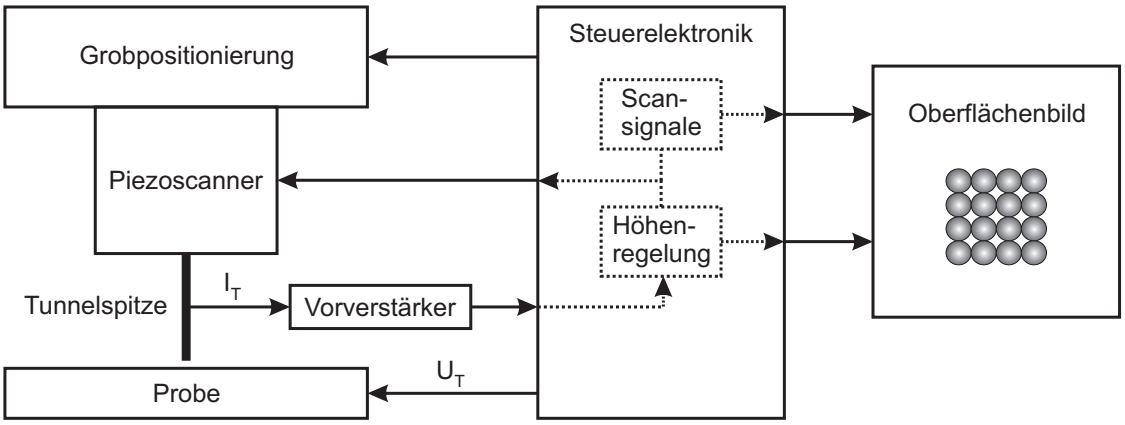


Abbildung 1.2: Schematischer Aufbau eines Tunnelmikroskops

der Probenabtastung (siehe Abbildung 1.2). Ein besonderes Konstruktionsproblem liegt in der Annäherung von Tunnelspitze und Oberfläche. Die Messspitze muss aus einigen Millimetern oder Zentimetern bis auf Bruchteile eines Nanometers an die Oberfläche geführt und dort in konstantem Abstand gehalten werden, ohne die Oberfläche zu berühren. Hierzu ist eine Kopplung einer groben Höhenverstellung der Spitze an die Höhenregelung durch das Nanopositioniersystem unerlässlich. Zur Nanopositionierung werden meist Piezokeramiken eingesetzt, die ihre Länge bei Anlegen einer Spannung bis zu einigen hundert Volt definiert ändern. Konzepte zur Grobpositionierung existieren viele. Einige Beispiele sind Elektromotoren mit Feingewindespindeln, Piezomotoren oder elektromagnetische Tauchspulen.

1.2 Theorie des Tunnelprozesses

Hauptaugenmerk dieser Arbeit liegt auf der Untersuchung metallischer Nanostrukturen auf metallischen Oberflächen. Daher soll hier der Tunnelprozess nur anhand zweier metallischer Elektroden betrachtet werden. Bei Messungen mit dem Tunnelmikroskop werden Tunnelspitze und Probe auf Bruchteile eines Nanometers zusammengebracht (siehe Abbildung 1.3). Durch die zwischen Spitze und Probe angelegte Tunnelspannung U_T wird die Fermienergie E_{F1} der Spitze leicht um die Energie eU_T gegen die Fermienergie der Probe E_{F2} verschoben. Diese Verschiebung reicht aber nicht aus, um Elektronen aus dem Leitungsband der Spitze die Potentialbarriere zwischen den beiden Metallen direkt überwinden zu lassen. Aufgrund des quantenmechanischen Tunneleffekts können aber einige Elektronen aus dem Spitzenleitungsband in Nähe von E_{F1} die Potentialbarriere durchqueren (*durchtunneln*) und freie Zustände im Leitungsband der Probe oberhalb von E_{F2} besetzen. Der Tunnelprozess kann entweder direkt (*elastisch*) oder unter Anregung eines Phonons mit Energie $\hbar\Omega$ (*inelastisch*) erfolgen. Durch Umpolen der angelegten Spannung U_T kann auch ein Tunnelstrom von der Probe zur Messspitze fließen.

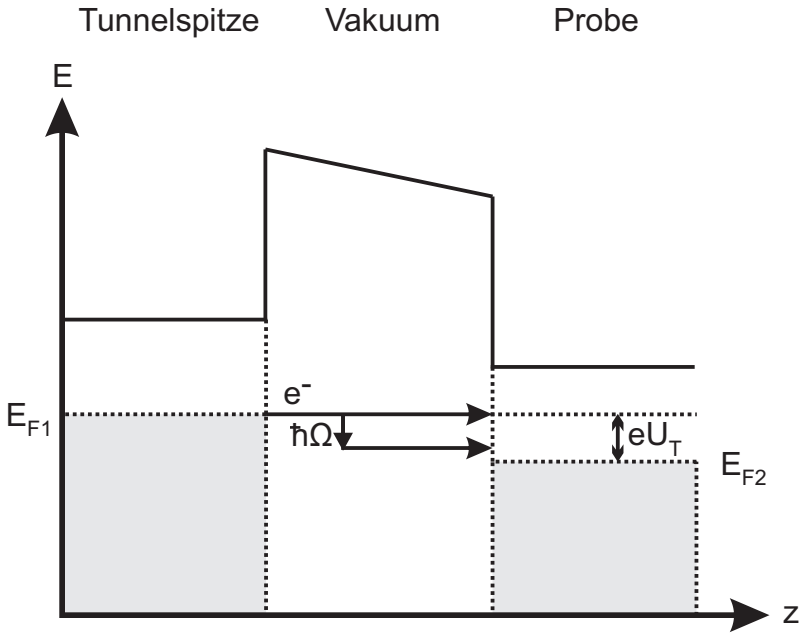


Abbildung 1.3: Potentialbarriere zwischen Tunnelspitze und Probe

Bardeen (siehe [Bar1961]) berechnete 1961 mithilfe der Störungstheorie die Übergangsrate $\omega_{\mu\nu}$ für elastisches Tunneln innerhalb eines Tunnelkontakts vom Zustand ψ_μ auf der einen Barrierenseite in einen Zustand ψ_ν auf der anderen Barrierenseite:

$$\omega_{\mu\nu} = \frac{2\pi}{\hbar} |M_{\mu\nu}|^2 \, \delta (E_\mu - E_\nu) \tag{1.1}$$

Hierbei wird nur eine schwache Kopplung der beiden in Tunnelkontakt stehenden Elektroden angenommen. E_μ und E_ν bezeichnen die Energien der beiden Zustände ψ_μ und ψ_ν. $M_{\mu\nu}$ ist das Übergangsmatrixelement des Tunnelkontakts.

$$M_{\mu\nu} = \frac{\hbar^2}{2m} \int_A d\vec{A} \left(\psi_\mu^* \vec{\nabla} \psi_\nu - \psi_\nu \vec{\nabla} \psi_\mu^* \right) \tag{1.2}$$

Integration erfolgt über eine beliebige Fläche A, die die beiden Elektroden voneinander trennt. Um den Tunnelstrom I_T zu berechnen, wird die Übergangsrate $\omega_{\mu\nu}$ mit der Besetzungswahrscheinlichkeit $f(E_\mu)$ des Ausgangszustandes ψ_μ und der Wahrscheinlichlichkeit $[1 - f(E_\nu + eU_T)]$ der Nichtbesetzung des Endzustands ψ_ν multipliziert und dann über alle Ausgangs- und Endzustände summiert.

$$I_T = \frac{2\pi e}{\hbar} \sum_{\mu\nu} f(E_\mu) \left[1 - f(E_\nu + eU_T) \right] |M_{\mu\nu}|^2 \, \delta \left(E_\mu - (E_\nu + eU_T) \right) \tag{1.3}$$

Da die tunnelnden Elektronen Fermionen sind, wird ihre Besetzungswahrscheinlichkeit durch die Fermifunktion gegeben:

$$f(E) = \frac{1}{1 + e^{\frac{E-E_F}{k_B T}}} \tag{1.4}$$

Bardeens Ansatz gilt für beliebige, elastische Tunnelvorgänge.

Tersoff und Hamann betrachteten 1983 mit diesem Ansatz den speziellen Tunnelübergang zwischen Messspitze und Probe im Tunnelmikroskop (siehe [Ter1983] und [Ter1985]). Dabei wird eine Tunnelspitze mit kugelförmigem Ende mit Radius R gegenüber einer ebenen Oberfläche angenommen. Der Mittelpunkt des Spitzenendes befindet sich bei $\vec{r_0}$. Außerdem wird der Grenzfall kleiner Tunnelspannungen $U_T \to 0$ und niedriger Temperaturen $T \to 0$ betrachtet. Daraus ergibt sich folgender Ausdruck für den Tunnelstrom I_T:

$$I_T(\vec{r_0}, U_T) = \frac{2\pi}{\hbar} \int_{E_F}^{E_F + eU_T} dE \rho_S(E - eU_T) T(\vec{r_0}, E, eU_T) \rho_P(\vec{r_0}, E) \tag{1.5}$$

ρ_S und ρ_P bezeichnen die lokale elektronische Zustandsdichte von Spitze und Probe. T ist der Transmissionskoeffizient für den Tunnelkontakt. Lösen des Integrals in Gleichung 1.5 liefert die Beziehung:

$$I_T \propto U_T \cdot D_S(E_F) \cdot \rho_P(\vec{r_0}, E_F) \tag{1.6}$$

D_S ist die elektronische Zustandsdichte der Tunnelspitze pro Volumeneinheit. Der Tunnelstrom I_T entspricht also bei konstanter Zustandsdichte der Spitze und konstanter angelegter Tunnelspannung U_T der lokalen Zustandsdichte der Probe ρ_P am Krümmungsmittelpunkt der Messspitze an der Fermienergie E_F. Das Tunnelmikroskop bildet folglich die Kontur der lokalen elektronischen Zustandsdichte der Probe in der Nähe der Fermienergie ab. Dieses Ergebnis gilt natürlich nur für eine schwache Kopplung zwischen Spitze und Probenoberfläche. Für eine metallische Tunnelspitze und eine metallische Probe ist dies jedoch gegeben.

Kapitel 2

Anforderungen an die Echtzeitsteuerung

In diesem Kapitel werden zunächst die Anforderungen an ein Steuersystem für Tunnelmikroskope aufgestellt. Hierbei wird zwischen allgemeinen und projektspezifischen Erfordernissen unterschieden. Kommerzielle Steuerungen sind am Markt in verschiedensten Ausführungen und Preislagen vorhanden. In Abschnitt 2.3 wird diskutiert, inwieweit einige der bekannteren kommerziellen Steuerungen den gestellten Anforderungen gerecht werden.

2.1 Allgemeine Anforderungen

Schon kurz nach Entwicklung der Tunnelmikroskopie sind die Möglichkeiten eines volldigitalen Steuerungsystems diskutiert worden [Pin1989]. Kurze Zeit später erschienen die ersten Systeme, die einer analogen Elektronik ebenbürtig waren [Won1993]. Zahlreiche Verbesserungen der Kontrollalgorithmen und Weiterentwicklung der Computerhardware führten im Folgenden zur fast flächendeckenden Übernahme der Digitaltechnik in der Tunnelmikroskopie (siehe [Bar1997], [Mun1998] und [Hum2000]). Heutzutage können digitale Kontrollsysteme bis zu 200 Bildern pro Sekunde aufnehmen und verarbeiten [Ros2005]. Viele dieser Entwicklungen sind im Laufe der Zeit einer kommerziellen Verwertung zugeführt worden. Trotz dem Aufbau auf unterschiedlichsten Hardwareplattformen versuchen alle diese Systeme einen bestimmten Satz von Anforderungen zu erfüllen, der aus dem grundlegenden Messprinzip der Tunnelmikroskopie resultiert:

- Generierung von Hochspannungssignalen zur Ansteuerung eines Piezoscanners
- hohe Genauigkeit der Höhenregelung

- hohe Genauigkeit der Datenerfassung und -verarbeitung
- Erfassung zusätzlicher Datenkanäle für Spektroskopieanwendungen
- flexible Kontrolle aller Instrumentenparameter während der Messung
- geringer elektronischer Rauschpegel
- geringe elektronische Drift

Beim Übergang zwischen der Betrachtung von statischen Oberflächen zur Abbildung dynamischer Prozesse von Nanostrukturen gewinnen noch weitere Faktoren an Gewicht [Mor1996]:

- hohe Geschwindigkeit der Höhenregelung
- hohe Geschwindigkeit der Datenerfassung und -verarbeitung

Inwiefern einzelne Punkte dieses Anforderungskataloges nur der Software oder nur der Hardware des Kontrollsystems zugeordnet werden können ist oft unklar. Gerade bei moderneren Steuerplattformen kann die klassische Grenze zwischen Software- und Hardwareaufgaben verschwimmen [Zah2003].

2.2 Projektspezifische Anforderungen

Die im Laufe dieser Arbeit entwickelte Echtzeitsteuerung kommt bei verschiedenen Anwendungen zum Einsatz, die alle ihre spezifischen Anforderungen an das System stellen.

2.2.1 *SONOS* Projekt

Die weitgehendsten Forderungen stellt hier das *Scanning Probe Microscope for Bio- and Nanotechnology onboard the International Space Station ISS*-Projekt (*SONOS*) der *European Space Agency* (*ESA*) (siehe Abschnitt 5.1). Ziel des *SONOS*-Projektes ist die feste Installation eines Tunnelmikroskops an Bord der internationalen Raumstation *ISS*. Die größten Herausforderungen für die Echtzeitsteuerung ergeben sich dabei nicht aus wissenschaftlichen Fragestellungen sondern aus den technischen Schwierigkeiten eines Einsatzes im nahen Erdorbit [Wal1991].

- Aufbau des Kontrollsystems in einer räumlichen Einheit

- robustes Design zum Abfangen der Startbeschleunigung
- Abschirmung gegen ionisierende Höhenstrahlung
- kleine äußere Abmessungen
- geringes Gewicht
- komplette Fernsteuerung über eine Standard-Netzwerkschnittstelle von verschiedenen Basisstationen
- autonome Funktion bei Verbindungsverlust zur Basisstation
- Möglichkeit zur Fernwartung
- Möglichkeit zur Implementierung neuer Funktionen über die Fernwartungsverbindung

2.2.2 Multiskalen-Tunnelmikroskop

Weiterhin soll das Kontrollsystem zur Ansteuerung eines Multiskalen-Tunnelmikroskopes verwendet werden (siehe Abschnitt 5.2). Die mit diesem Mikroskop abbildbaren Längenskalen sollen einen Bereich von etlichen Größenordnungen überstreichen. Dazu muss eine Kombination verschiedener Positionierungssysteme eingesetzt werden, von denen jedes eine eigene Kontrolleinheit benötigt. Die resultierenden Anforderungen sind die folgenden:

- Steuerung mehrerer Kontrolleinheiten von einer Basisstation aus
- Speicherung der Ansteuerparameter der Positionierungssysteme auf den zugehörigen Kontrolleinheiten
- autonome Positionsstabilisierung bei Unterbrechen der Verbindung zur Basisstation

2.2.3 Ausstattung von Schülerlaboren

Am *Deutschen Museum* in München existiert in Zusammenarbeit mit der Firma *National Instruments* ein Projekt zur Ausbildungsförderung im Bereich der Nanotechnologie. Dazu sollen ausgewählte Schülerlabore mit Tunnelmikroskopiearbeitsplätzen in Klassenstärke ausgestattet werden (siehe Abschnitt 5.3). Hierbei ist die Echtzeitsteuerung als Kontrollsystem vorgesehen. Dies beinhaltet weitere Forderungen an das Gesamtsystem.

- niedrige Stückkosten, um die Finanzierbarkeit des Projektes sicherzustellen
- Betrieb vieler Elektroniken an einem Subnetzwerk
- Wahlweise Steuerung der Tunnelmikroskope durch Schülerarbeitsplätze oder einen Betreuerarbeitsplatz

2.3 Analyse einiger kommerzieller Systeme

Seit Entwicklung der Rastertunnelmikroskopie und verwandter Verfahren haben sich einige dutzend kommerzielle Kontrolleinheiten am Markt etabliert. Die allgemeinen Anforderungen werden in einem gewissen Rahmen von allen Systemen erfüllt. Einige bekanntere Entwicklungen sollen nun in Hinsicht auf die speziellen Projektanforderungen diskutiert werden.

2.3.1 Kontrollsystem *SPM-1000* von *RHK*

Die amerikanische Firma *RHK* [1] fertigt Einzelteile oder komplette Systeme für die Rastersondenmikroskopie. Ihre Steuerung *SPM-1000* für Tunnelmikroskope ist im oberen Marktsegment angesiedelt. Zur Datenerfassung benutzt sie eine Kombination aus Echtzeitprozessor und *Field-Programmable-Gate-Array* (*FPGA*). Die Datenübertragung zum Benutzercomputer erfolgt über einen Hochgeschwindigkeitsbus, der eine Erweiterung des Anwenderrechners mit speziellen Ein-/Ausgabekarten erfordert. Die Kontrolleinheit hat die Abmessungen $48cm$ x $43cm$ x $28cm$ und wiegt $23kg$. Durch die fehlende Möglichkeit der Fernwartung ist eine Anwendung für das *SONOS*-Projekt ausgeschlossen. Für eine Ausstattung von Schülerlaboren ist das System zu teuer. Weiterhin fehlt eine Option zur Synchronisation mehrerer Steuersysteme. Ein Einsatz an dem Multiskalen-Mikroskop ist daher nicht möglich.

2.3.2 Kontrollsystem *SPM Controller* von *Nanonis*

Die schweizer Firma *Nanonis* [2] platziert ihre Steuerelektronik *SPM Controller* ebenfalls im obersten Preissegment. Das Steuersystem basiert auf einem Echtzeitrechner von *National Instruments* mit *FPGA*-Funktionalität. Eine Funktion zur Fernsteuerung über Ethernet ist vorhanden. Ein Platzbedarf von drei bis sechs $19''$-Einschüben ist jedoch zu viel für die internationale Raumstation. Die Flexibilität, besonders die Schnittstelle zur Programmiersprache *LabVIEW* von *National Instruments*, machen das System für den Einsatz an dem Multiskalen-Tunnelmikroskop

[1] www.rhk-tech.com
[2] www.nanonis.com

interessant. Für die Verwendung an einer Vielzahl von Schülerarbeitsplätzen ist es ebenfalls zu teuer.

2.3.3 Kontrollsystem *MATRIX* von *Omicron*

Eine deutsche Produktion ist die Steuerung *MATRIX* von *Omicron* [3]. Sie baut auf einem Multiprozessorsystem aus eigener Entwicklung auf. Datenkommunikation mit dem Benutzerarbeitsplatz erfolgt über eine Ethernetschnittstelle. Die flexible Multiprozessorumgebung ist hervorragend für komplexe Anwendungen wie das Multiskalen-Tunnelmikroksop geeignet. Aus Kostengründen ist das System jedoch uninteressant für Bildungsanwendungen. Hoher Raumbedarf und hohes Gewicht verhindern einen Einsatz bei dem *SONOS*-Projekt.

2.3.4 Kontrollsystem *SPM* von *Anfatec*

Das Steuersystem *SPM* der deutschen Firma *Anfatec* [4] besteht aus einem um *FPGA*-Funktionalität erweiterten, handelsüblichen *PC*. Das gute Preis-Leistungs-Verhältnis machen das Produkt für eine Anwendung im Bildungssektor interessant. Die damit einhergehende, eingeschränkte Funktionalität und fehlende Fernwartungsoptionen lassen aber eine Verwendung für das *SONOS*- oder Multiskalen-Mikroskop ausscheiden.

2.4 Schlussfolgerung

Keines der vorgestellten kommerziellen Systeme erfüllt alle projektspezifischen Anforderungen. Daher gibt es nur zwei Alternativen für die Durchführung der betrachteten Projekte: Anschaffung verschiedener kommerzieller Steuerung für die verschiedenen Projekte oder Entwicklung eines für alle Aufgaben geeigneten Kontrollsystems. Der finanzielle Aufwand für die Verwirklichung der zweiten Option fällt erheblich geringer aus als der für die Umsetzung der ersten Option. Außerdem bleiben bei der zweiten Option die Systeme der unterschiedlichen Anwendungen kompatibel und daher leichter koordinierbar. Aus diesen Gründen wird eine Eigenentwicklung den kommerziellen Lösungen vorgezogen.

[3] www.omicron.de
[4] www.anfatec.com

Kapitel 3

Hardware der Echtzeitsteuerung

In diesem Kapitel wird die Hardware-Umsetzung der in der Einleitung umrissenen Echtzeitsteuerung im Detail beschrieben. Zum Erreichen der geforderten Leistungseckpunkte ist das gewählte Hardware-Design von entscheidender Bedeutung. Besonders die Qualität der Steuersignale an das Tunnelmikrokop wird hier festgelegt. Diese Güte stellt eine obere Grenze für die Qualititität und Auflösung der späteren Messungen mit dem Mikroskop dar.

Abbildung 3.1: Vorderansicht der Kontrolleinheit

Die Hardware der Echtzeitsteuerung besteht im Wesentlichen aus zwei Elementen: einem handelsüblichen *PC* und einer Kontrolleinheit, die über beliebige Entfernungen via Ethernet miteinander verbunden sind. Hierbei muss sich der Standort der Kontrolleinheit aufgrund der vielfältigen Kabelverbindungen in direkter Nähe des zu steuernden Mikroskops befinden. Die Wahl des PC hat keinen Einfluss auf die Qualität der Steuersignale und beeinflusst lediglich die Ausführungsgeschwindigkeit der Kontrollsoftware und das äußere Erscheinungsbild des Anwenderarbeitsplatzes.

Abbildung 3.1 zeigt die fertige Kontrolleinheit. Sie enthält eine eigene Spannungs-

versorgung, einen Echtzeitrechner und mehrere Hochspannungsverstärker zur Ansteuerung des Tunnelmikroskops. Als geschlossene Einheit kann sie auch ohne verbundenen Benutzer-*PC* Grundfunktionen des angeschlossenen Instruments kontrollieren. Neben Hochspannungsverstärkern und Stromversorgung sind keine weiteren speziellen elektronischen Schaltungen zum Betrieb der Echtzeitsteuerung erforderlich. Alle notwendigen Funktionen werden in der Software des Echtzeitrechners implementiert. Dieses Konzept gibt dem Steuerungssystem eine enorme Flexibilität, da neue Aufgaben per Softwareänderung eingebaut werden können und keine aufwendige Hardwareentwicklung erfordern. Besonders beim Einsatz an nicht-kommerziellen Forschungsmikroskopen, die einen einzigartigen Satz an Kontrollsignalen fordern, ist dies von großem Nutzen.

In Abschnitt 3.1 wird der mechanische Aufbau der Kontrolleinheit beschrieben und ein Überblick über die Verschaltung der verschiedenen elektronischen Komponenten gegeben. Abschnitt 3.2 fasst die Funktionsweise des verwendeten Echtzeitrechners zusammen. In den Abschnitten 3.3 und 3.4 werden die aus Eigenentwicklung stammenden Netzteile und Hochspannungsverstärker vorgestellt und ihre Leistungsdaten analysiert.

3.1 Aufbau der Kontrolleinheit

Die Kontrolleinheit ist in ein $19''$-Gehäuse der Firma *Schroff* [1] eingebaut. Das Gehäuse hat eine Höhe von drei genormten Höheneinheiten und ist vollständig elektromagnetisch abgeschirmt. Ein Einrastsystem der Gehäusewände gewährt schnellen Zugriff auf die Elemente im Inneren. Abbildung 3.2 zeigt das Innenleben der Kontrolleinheit.

Oben links ist der Echtzeitrechner eingebaut. Auf genormten Bauteileträgern montiert, sind im vorderen Teil des Gehäuses von links nach rechts der Signaleingang, die Hochspannungsverstärker, das Hochspannungsnetzteil und die Niederspannungsnetzteile untergebracht. Echtzeitrechner und Hochspannungsverstärker besitzen selber noch einmal eine elektromagnetische Abschirmung, um ein Übersprechen der einzelnen Regelsignale zu verhindern. Die Spannungsversorgung der Hochspannungsverstärker erfolgt über einen Strombus aus 20-pol. Flachbandkabel. Alle Signalleitungen sind über abgeschirmtes Koaxialkabel geführt. Die Verbindung zum Tunnelmikroskop wird über *BNC*-Buchsen [2] an der Vorderseite des Gerätes hergestellt.

Abbildung 3.3 zeigt einen Übersichtsschaltplan der Kontrolleinheit. Vier Netzteile (*Echtzeitrechner*, $100V$, $12V$, $5V$) erzeugen die zum Betrieb erforderlichen Span-

[1] www.schroff.de

[2] Der *BNC*-Steckverbinder (*Bayonet-Nut-Connector*) ist ein koaxialer Steckverbinder mit einem Bajonettverschluss für hochfrequente Signale bis $1GHz$.

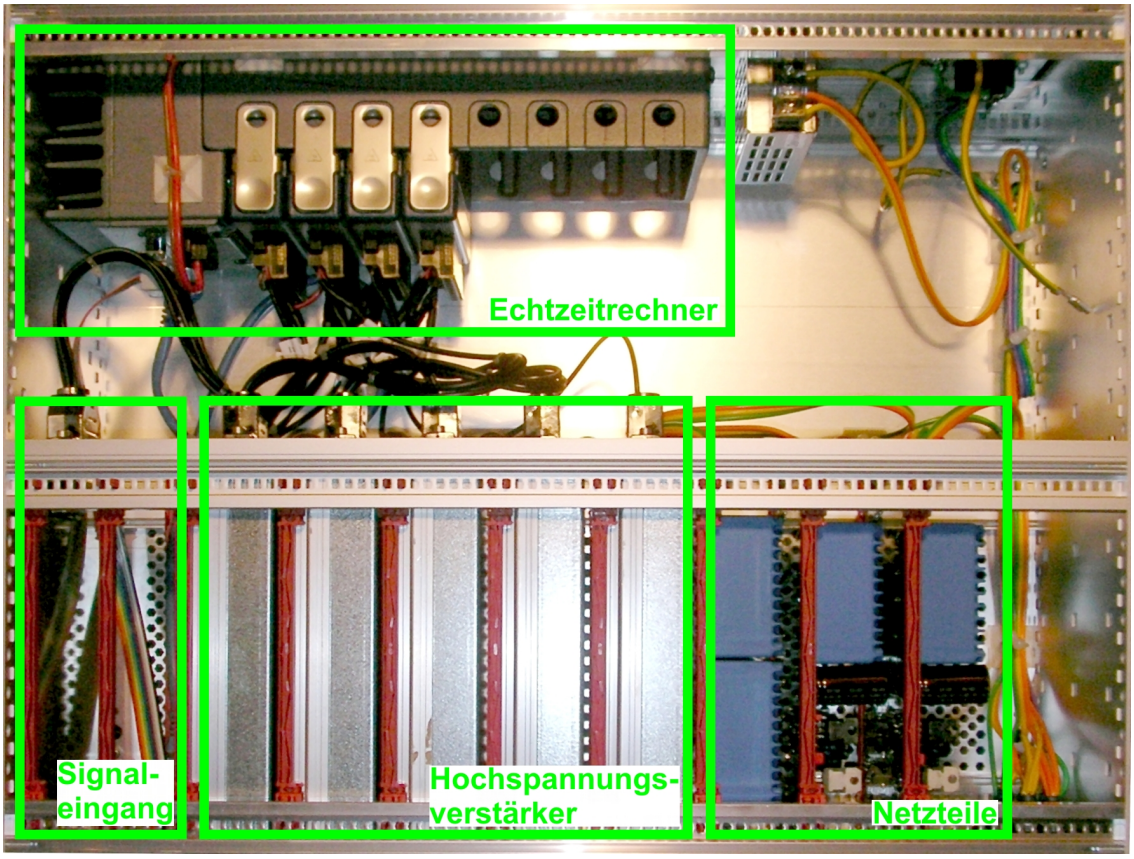


Abbildung 3.2: Innenansicht der Kontrolleinheit

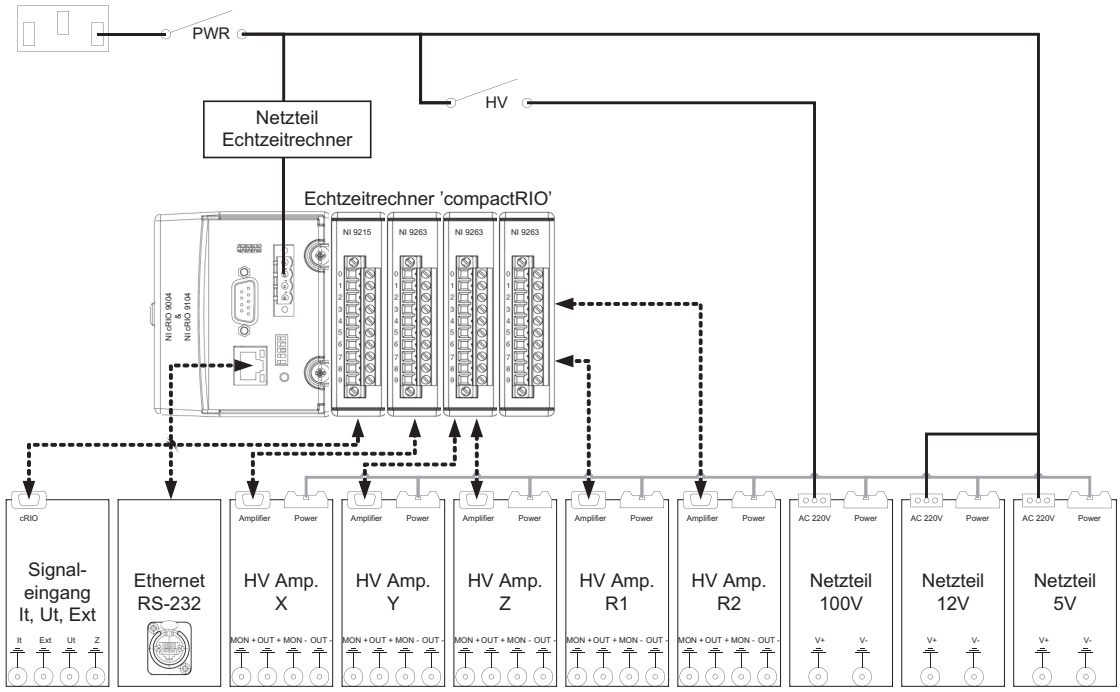


Abbildung 3.3: Übersichtsschaltplan der Kontrolleinheit

nungen aus der Netzspannung. Die Niederspannungsnetzeile bieten zusätzlich noch hochstabilisierte Spannungsausgänge von $\pm 5V$ und $\pm 12V$ an der Vorderseite der Elektronik zur Versorgung eines Tunnelstromverstärkers. Das Hochspannungsnetzteil besitzt einen separaten Ein/Aus-Schalter, um die Hochspannung für Justierarbeiten am Tunnelmikroskop abschalten zu können. Das System verfügt über fünf identische Hochspannungsverstärker, die direkt vom Echtzeitrechner kontrolliert werden. Drei dienen der Ansteuerung des Piezoscanners (*HV Amp. X, HV Amp. Y, HV Amp. Z*), zwei ermöglichen den Betrieb eines Piezomotors zur Grobannäherung der Tunnelspitze (*HV Amp. R1, HV Amp. R2*). Die Signaleingänge und -ausgänge (I_T, Ext, U_T), der Ethernetanschluss und die RS-232 Schnittstelle sind an die Vorderseite der Einheit geführt. Der Ethernetanschluss dient zur Kommunikation mit dem Benutzer-*PC*, die *RS-232*-Schnittstelle zur Kontrolle weiterer Peripheriegeräte durch den Echtzeitrechner. Das Referenzpotenzial der Steuerelektronik und die Netz-erde sind galvanisch getrennt geführt und können über eine Steckbrücke verbunden werden. So ist es möglich, das Referenzpotenzial gegebenenfalls von einer gestörten Netzerde auf eine sauberere Messerde zu legen.

3.2 Echtzeitrechner *compactRIO*

Der Echtzeitrechner *compactRIO* ist ein industrietaugliches Datenerfassungs-, Steuer- und Regelsystem der Firma *National Instruments* [3]. Bei Abmessungen von $180mm$ x $90mm$ x $90mm$, einem Gewicht von $1,5kg$ und einem Stromverbrauch von $10W$ kann er in einem Temperaturbereich von $-40°C$ bis $+70°C$ und bei Beschleunigungen bis zu $50g$ betrieben werden. Weiterhin besitzt der Rechner eine vollständige elektromagnetische Abschirmung und eine Isolierung gegen Spannungen von bis zu $2300V$. Das System besteht aus einem Echtzeitprozessor, einem *Field-Programmable-Gate-Array* (*FPGA*) und bis zu acht analogen oder digitalen Ein- oder Ausgabemodulen (Abbildung 3.4). Echtzeitprozessor und *FPGA* sind über einen *PCI*-Bus [4] miteinander verbunden. Jedes Ein- oder Ausgabemodul verfügt über eine separate Anbindung an den *FPGA* um eine möglichst hohe Zugriffsgeschwindigkeit zu erreichen.

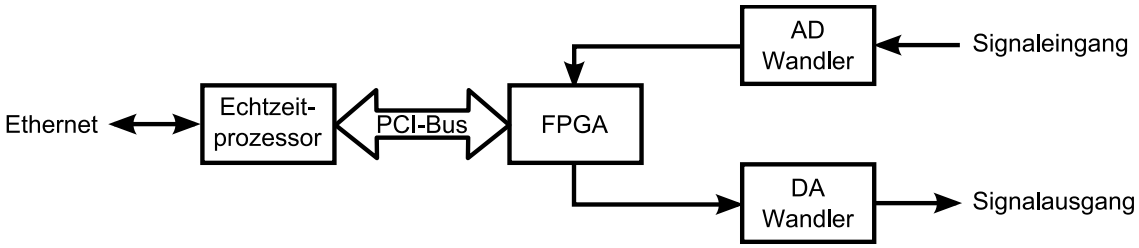


Abbildung 3.4: Aufbau des Echtzeitrechners *compactRIO*

Der Echtzeitprozessor ist ein Vertreter der *Pentium*-Serie mit einer Taktfrequenz von $200MHz$. Er besitzt $64MB$ Hauptspeicher und $512MB$ Festspeicher. Zur Kommunikation stehen eine $10/100MBit$ *Ethernet*-Anbindung und eine *RS-232*-Schnittstelle zur Verfügung. Der Echtzeitrechner ist über die *Ethernet*-Schnittstelle vollständig fernwartbar. Der *FPGA* vermag Teile des Programmcodes des Echtzeitrechners als Hardwareschaltung zu synthetisieren. Hierzu stehen dem System drei Millionen frei programmierbare logische Gatter zur Verfügung. Durch die direkte Verschaltung mit den Ein- und Ausgabemodulen ermöglicht das den Aufbau von geschlossenen (closed-loop) Hardwareregelkreisen, deren Zeitverhalten nicht durch Bus- oder Softwarekommunikation bestimmt wird. Diese Regelkreise bieten daher einen vollständig deterministischen Steuerungsablauf. Gleichzeitig können über den Anschluss an den *PCI*-Bus große Datenmengen schnell vom *FPGA* an den Echtzeitprozessor gesandt werden. Im vorliegenden System ist der Echtzeitrechner mit einem Analogeingabemodul (*NI 9215*) und drei Analogausgabemodulen (*NI 9263*) bestückt. Alle Module besitzen vier Ein- oder Ausgabekanäle, eine maximale Abtastfrequenz von $100kHz$ und eine digitale Auflösung von 16-Bit. Zwei Eingabekanäle sind mit dem Ausgang des Tunnelstromverstärkers I_T verbunden, jeweils

[3] www.ni.com

[4] Der *PCI*-Bus (*Peripheral-Component-Interconnect*) ist heutzutage der am weitesten verbreitete Hochgeschwindigkeits-Bus zur Verbindung von Peripheriegeräten mit einem Prozessor.

einer für den geschlossenen Regelkreis der Höhenregelung und das Einlesen der Messdaten. Zwei weitere Eingangskanäle werden für das Einlesen der Höhendaten und eines externen Signalkanals *Ext* benutzt. Ein Ausgabekanal dient zur Erzeugung der Tunnelspannung U_T. Die restlichen Ausgabekanäle verteilen sich auf die Steuerung der fünf Hochspannungsverstärker (*X, Y, Z, R1, R2*). Pro Hochspannungsverstärker werden drei Kanäle verwendet, jeweils einer zur Ausgabe des Regelsignals, zur Verstärkungsumschaltung und zur Wahl des Verstärkeroffsets.

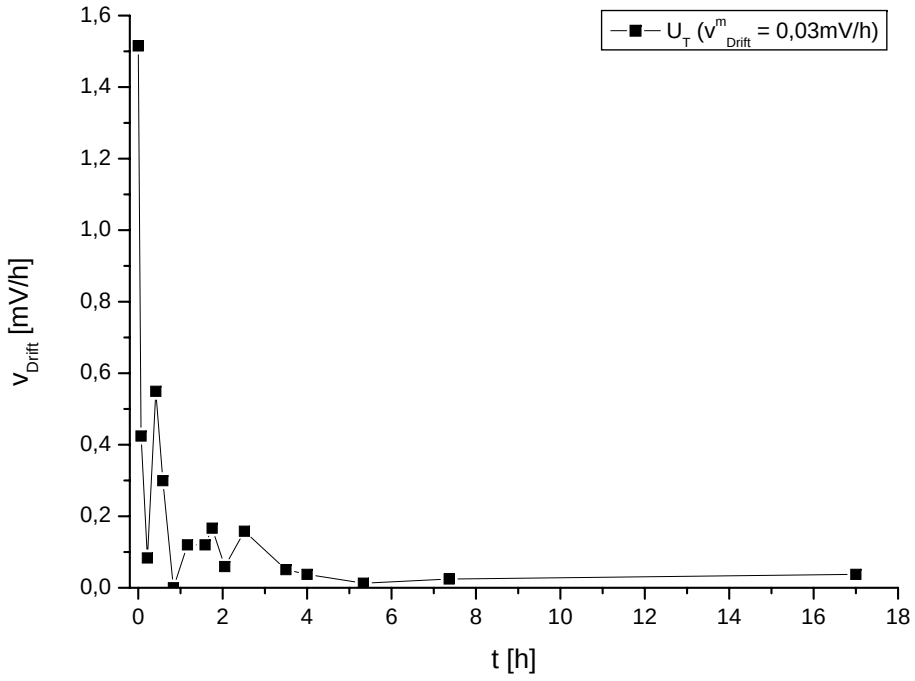


Abbildung 3.5: Elektronische Drift der Tunnelspannung (v^m_{Drift} bezeichnet die mittlere Drift nach 3h)

Die elektronische Drift (Abbildung 3.5) und das mittlere Rauschen (Abbildung 3.7) der Ein- und Ausgabemodule wird exemplarisch am Kanal der Tunnelspannung U_T betrachtet. Das mittlere Rauschen liegt bei $0,5mV$, die Drift nach drei Stunden Aufwärmphase bei $30\frac{\mu V}{h}$. Damit ist der Echtzeitrechner die kleinste Quelle von elektronischer Drift und elektronischem Rauschen im Verbund der Echtzeitsteuerung.

3.3 Spannungsversorgungen

Zum Betrieb der Echtzeitsteuerung ist die Bereitstellung von verschiedenen Versorgungsspannungen erforderlich. Für den Echtzeitrechner und die Hochspannungs-

verstärker sind $\pm 12V$ nötig, für manche Vorverstärker noch weitere $\pm 5V$ Niederspannung. Außerdem braucht der Hochspannungsverstärker noch eine Versorgung mit $\pm 100V$. Die Betriebsspannungen für den Vorverstärker und Hochspannungsverstärker müssen hoch stabil sein, um Einkoppeln von elektrischen Störsignalen in die Messgrößen zu verhindern. Besonders Störungen durch eine nicht ganz gleichgerichtete Netzspannung müssen verhindert werden.

3.3.1 Niederspannungsnetzteile

Das $12V$-Netzteil für den Echtzeitrechner ist ein handelsübliches Schaltnetzteil. Da der Rechner über eine eigene Spannungsglättung und -filterung verfügt, sind hier keine weiteren Stabilisierungsmaßnahmen notwendig. Abbildung 3.6 zeigt ein Blockschaltbild der Niederspannungsnetzteile für Hochspannungs- und Vorverstärker. Die $220V$ Netzspannung werden über einen Niederspannungstransformator herunter transformiert und im positiven Zweig der Schaltung über einen Brückengleichrichter gleichgerichtet. Danach folgt eine aktive Siebung über eine Komplementärdarlingtonstufe (siehe [Tie1986]) um die hinter dem Brückengleichrichter vorliegende Restwelligkeit zu eliminieren. Die so gereinigte Spannung wird über einen Festspannungsregler der *78xx*-Serie (*79xx*-Serie für negativen Zweig) stabilisiert. Eine weitere Siebung durch einen passiven Tiefpassfilter glättet die Spannung nochmals. Der Zweig zur Erzeugung der negativen Ausgangsspannung arbeitet nach demselben Schaltungsprinzip.

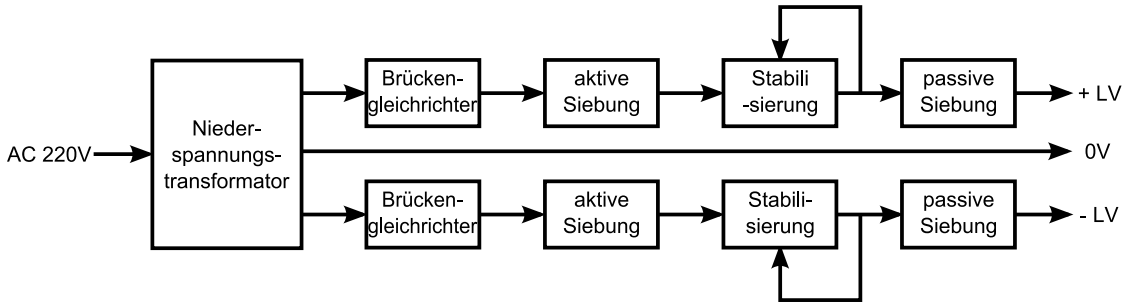


Abbildung 3.6: Blockschaltbild der Niederspannungsnetzteile

In Abbildung 3.7 sind die Rauschpegel der Niederspannungsnetzteile im Verlauf von zwei Sekunden dargestellt. Das $12V$-Netzteil weist eine mittlere Schwankung um seine Ausgangsspannung von $\Delta U = 0,6mV$ auf, die mittlere Schwankung des $5V$-Netzteil liegt bei $\Delta U = 0,3mV$. Damit erfüllen beide Netzteile gut den geforderten Rauschpegel von $\Delta U < 1mV$.

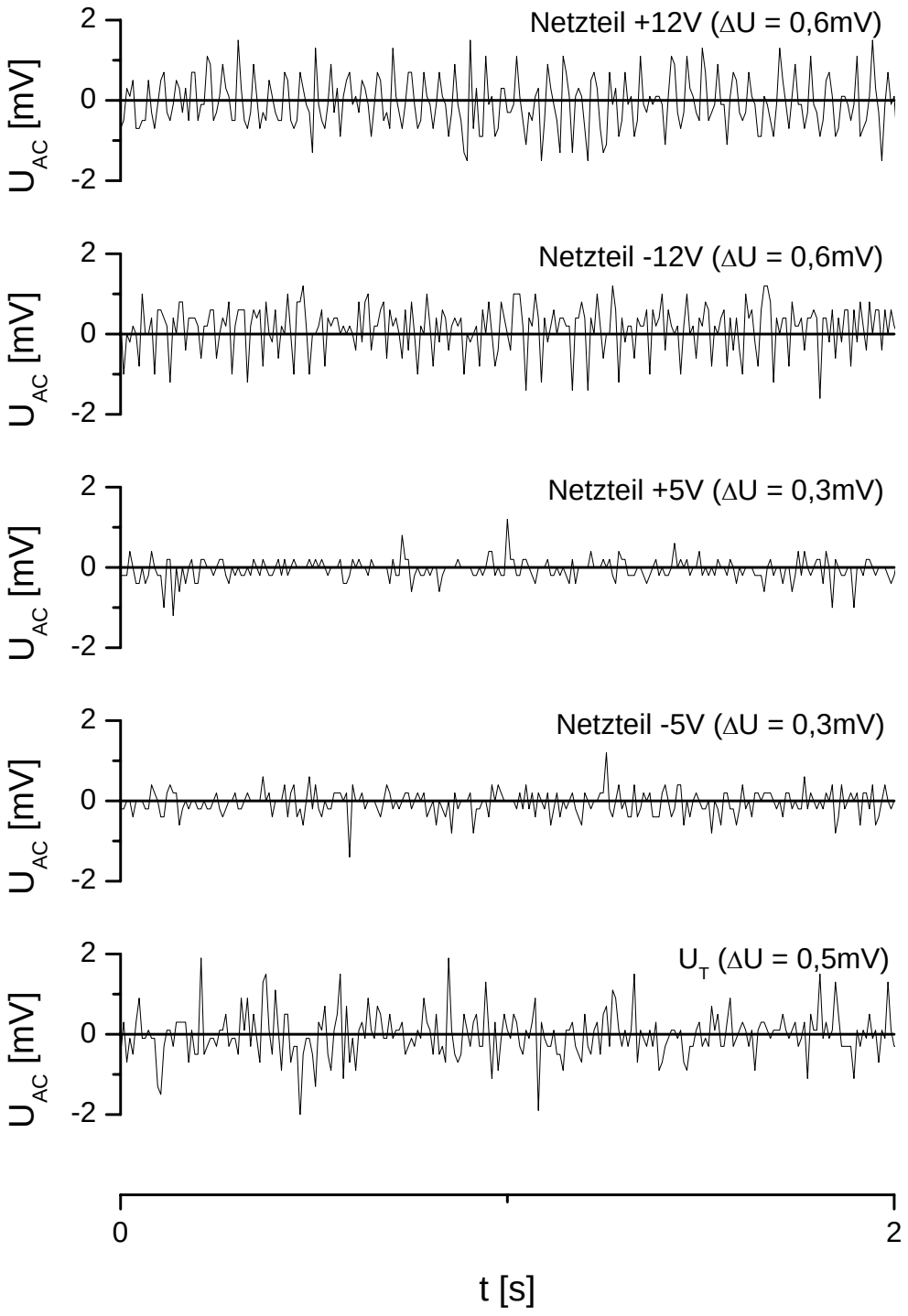


Abbildung 3.7: Rauschpegel der Niederspannungen

3.3.2 Hochspannungsnetzteil

Das Hochspannungsnetzteil stellt die $\pm 100V$ Versorgungsspannung für die Hochspannungsverstärker bereit. Ein Blockschaltbild des Netzteils ist in Abbildung 3.8 zu finden. Die $220V$ Netzspannung werden über einen Trenntransformator von der Netzerde getrennt und mit einem Brückengleichrichter in Gleichspannung umgewandelt. Eine Siebung durch einen passiven Tiefpassfilter glättet die Restwelligkeit hinter dem Gleichrichter. Eine weitere Stabilisierung der Hochspannung ist nicht notwendig, da der Hochspannungsverstärker unabhängig von den Versorgungsspannungen seine Ausgangsspannung konstant hält. Wie bei den Niederspannungsnetzteilen funktionieren positiver und negativer Zweig der Schaltung auf dieselbe Weise.

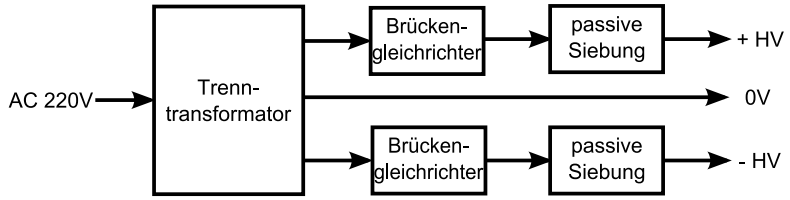


Abbildung 3.8: Blockschaltbild des Hochspannungsnetzteils

3.4 Hochspannungsverstärker

Die Hochspannungsverstärker zur Ansteuerung des Piezoscanners sind ein für die Qualität der Messung entscheidendes Element. Jedes elektronische Fehlverhalten wie Rauschen oder Drift wird über das Piezoelement direkt auf die Messspitze übertragen. Zwar sind am Markt eine Vielzahl von entsprechenden kommerziellen Verstärkermodulen vertreten, jedoch erfüllt keines die funktionalen und qualitativen Vorgaben im finanziellen Rahmen des Aufbauprojektes. Die Eigenentwicklung liefert einen Hochspannungsverstärker der ein Eingangssignal von $\pm 10V$ auf einen Ausgangsbereich von $\pm 1V$, $\pm 10V$ oder $\pm 100V$ bei einem variablen Offset von $\pm 100V$ umsetzt. Notwendig ist die variable Verstärkung um die verfügbaren 16-Bit digitale Auflösung der *DA*-Wandler für hochauflösende Messungen auf einen kleineren Spannungsbereich zu verteilen. Damit wird die minimal messbare Spannungs- und somit auch Höhendifferenz verringert. Über das Offsetsignal kann hierbei die Höhenregelung trotzdem den vollen Hub des Z-Piezos ausnutzen. Das Ausgangssignal ist jeweils als positves und dazu komplementäres negatives Signal verfügbar. Dies ist zur Ansteuerung der weit verbreiteten Röhrenpiezoelemente unverzichtbar. Der Wert der Ausgangsspannungen berechnet sich aus den Eingangssignalen nach folgender Formel:

$$
\begin{aligned}
U^{+}_{Ausgang} &= +0,1 \cdot U_{Eingang} \cdot \Theta\left(U_{0,1x} - U_{Gain}\right) \\
&\quad +0,9 \cdot U_{Eingang} \cdot \Theta\left(U_{1x} - U_{Gain}\right) \\
&\quad +99 \cdot U_{Eingang} \cdot \Theta\left(U_{10x} - U_{Gain}\right) - 10 \cdot U_{Offset}
\end{aligned} \tag{3.1}
$$

$$
\begin{aligned}
U^{-}_{Ausgang} &= -0,1 \cdot U_{Eingang} \cdot \Theta\left(U_{0,1x} - U_{Gain}\right) \\
&\quad -0,9 \cdot U_{Eingang} \cdot \Theta\left(U_{1x} - U_{Gain}\right) \\
&\quad -99 \cdot U_{Eingang} \cdot \Theta\left(U_{10x} - U_{Gain}\right) + 10 \cdot U_{Offset}
\end{aligned} \tag{3.2}
$$

$$\text{mit} \quad 0 \leq U_{0,1x} < U_{1x} < U_{10x}$$

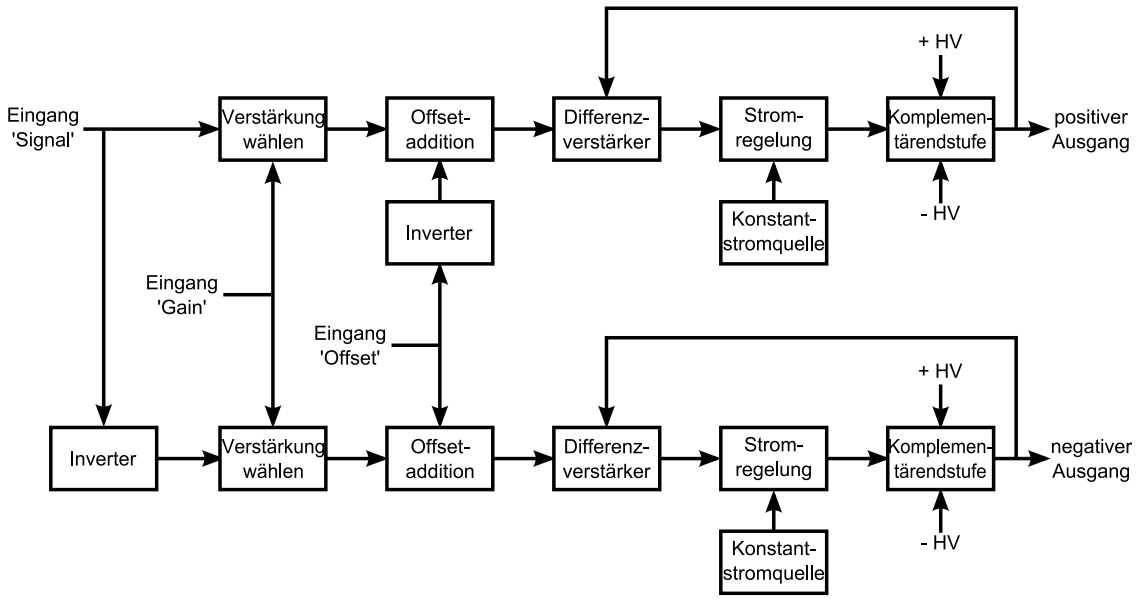


Abbildung 3.9: Blockschaltbild des Hochspannungsverstärkers

Abbildung 3.9 zeigt den schematischen Aufbau des Hochspannungsverstärkers. Geregelt wird die vom Hochspannungsnetzteil zur Verfügung gestellte Spannung ($+HV$, $-HV$) über eine stromgesteuerte Komplementärendstufe aus Leistungstransistoren der *MJE3xx*-Serie [5]. Angesteuert wird die Endstufe über einen Differenzverstärker der *LF4xx*-Serie [6], der den benötigten Steuerstrom über eine Stromregelung aus

[5] Die *MJE3xx*-Serie beinhaltet Standard-Hochspannungstransistoren auf Siliziumbasis die in einer Vielzahl industrieller Anwendungen wie z.B. Ablenkeinheiten von Röhrenmonitoren eingesetzt werden. Die Sperrspannung liegt bei $\pm 350V$ mit einem maximalen Kollektorstrom von $0,5A$. Die Transistoren können in einem Temperaturbereich von $-65°C$ bis $+150°C$ eingesetzt werden

[6] Die *JFET*-Operationsverstärker (*Junction-Field-Effect-Transistor*) der *LF4xx*-Serie zeichnen sich durch niedriges Rauschen ($0,01\frac{pA}{\sqrt{Hz}}$) und geringe Reaktionszeit ($10\frac{V}{\mu s}$) aus.

einer Konstantstromquelle erzeugt. Als Konstantstromquelle dient eine Stromspiegelschaltung, die mit festem Eingangsstrom betrieben wird (siehe [Tie1986]). Stabilisiert wird die Schaltung über eine Rückkopplung zwischen Signalausgang und Differenzverstärker. Das Verstärungsverhältnis bestimmt sich hierbei aus dem Verhältnis eines Vorwiderstandes im Eingangssignal des Differenzverstärkers zu einem Referenzwiderstand in der Rückkopplungsleitung. Abhängig von der am Eingang *Gain* anliegenden Spannung wählt die Verstärkungsvorwahl über ein *Print*-Relais für den Signaleingang Vorwiderstände aus, die einem Verstärkungsverhältnis von 10 : 1, 1 : 1 oder 1 : 10 entsprechen. Der Eingang *Offset* wird mit festem Verstärkungsfaktor 1 : 10 zu dem Eingangssignal addiert. Der Hochspannungsverstärker besitzt jeweils zwei solche Verstärkerlinien, von denen eine mit invertierten Eingangssignalen betrieben wird, um den negativen Ausgang zu erzeugen.

Optimierung des Rausch- und Frequenzverhaltens der Schaltung erfolgt experimentell durch sequenzielle Änderung der dieses Verhalten bestimmenden Widerstands- und Kapazitätswertes. Anschließende Messungen mit Testsignalen und deren Auswertung lassen eine Eingrenzung des besten Arbeitsbereiches zu. Das *Bode*-Diagramm [7] (siehe [Bec1998] und Abbildung 3.10) zeigt den Frequenz- und Phasengang des Hochspannungsverstärkers bei unterschiedlichen Verstärkungsfaktoren. Bei einem Verstärkungsverhältnis von 1 : 10 liegt die maximale noch übertragene Frequenz f_0 bei $10kHz$. Dies entspricht bei einem 128 x 128 Pixel großen Bild einer maximalen Bildrate von ca. 80 Bildern pro Sekunde. Dieser Wert liegt um einen Faktor 80 höher als die von dem Rest der Elektronik erreichten realen Bildraten. Für kleinere Verstärkungsfaktoren liegt f_0 sogar bei $60kHz$. Im Bereich von $10kHz$ bis $60kHz$ führt der Hochspannungsverstärker jedoch eine leichte Phasenverschiebung zwischen Eingangs- und Ausgangssignal von bis zu 20° ein.

[7] Das *Bode*-Diagramm (nach Hendrik Wade Bode) besteht aus einem Graph für die Amplitudenverstärkung und einem für die Phasenverschiebung. Es beschreibt die stationäre Reaktion an dem Ausgang eines Systems auf eine harmonische Anregung an dessen Eingang.

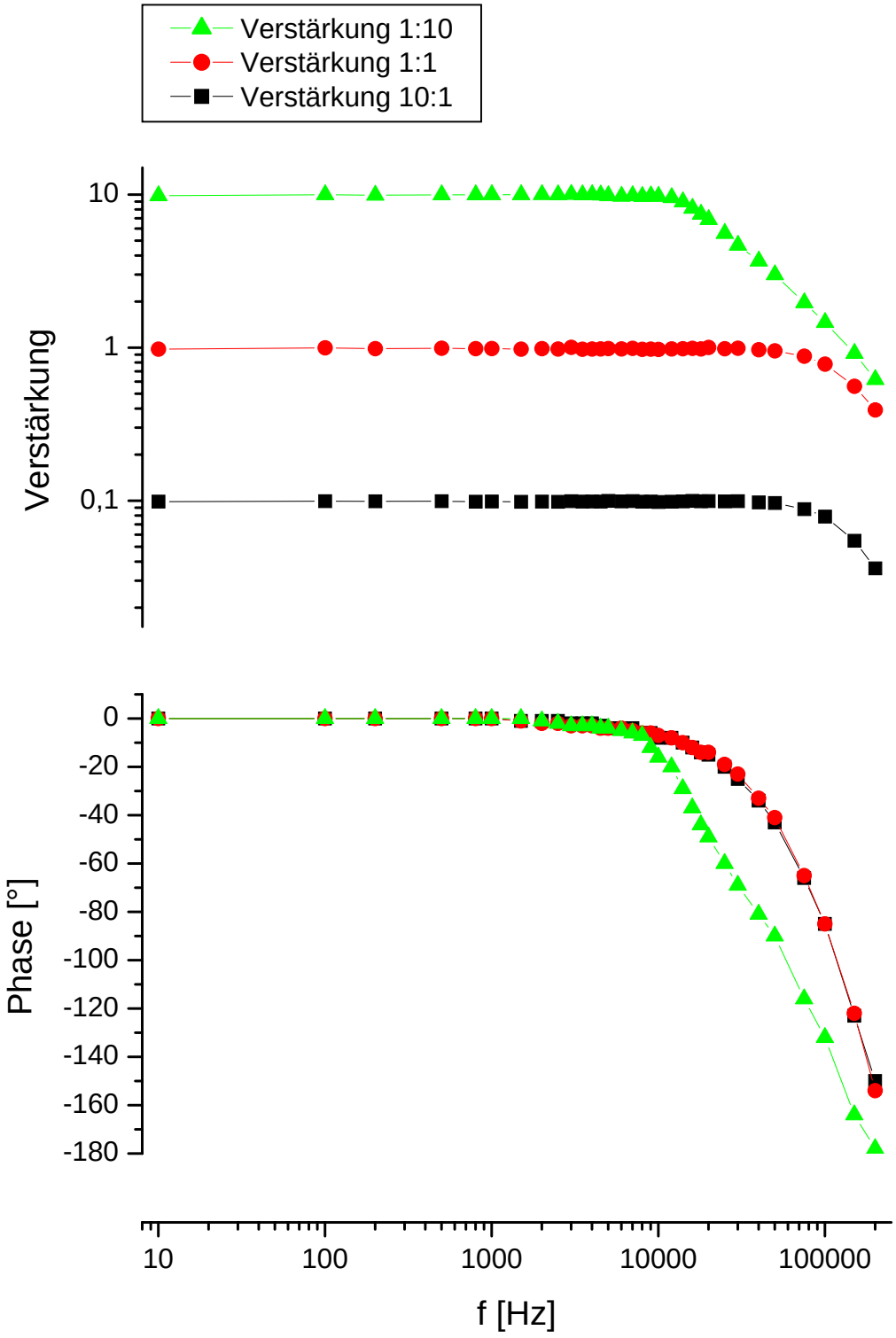


Abbildung 3.10: BODE-Diagramm des Hochspannungsverstärkers

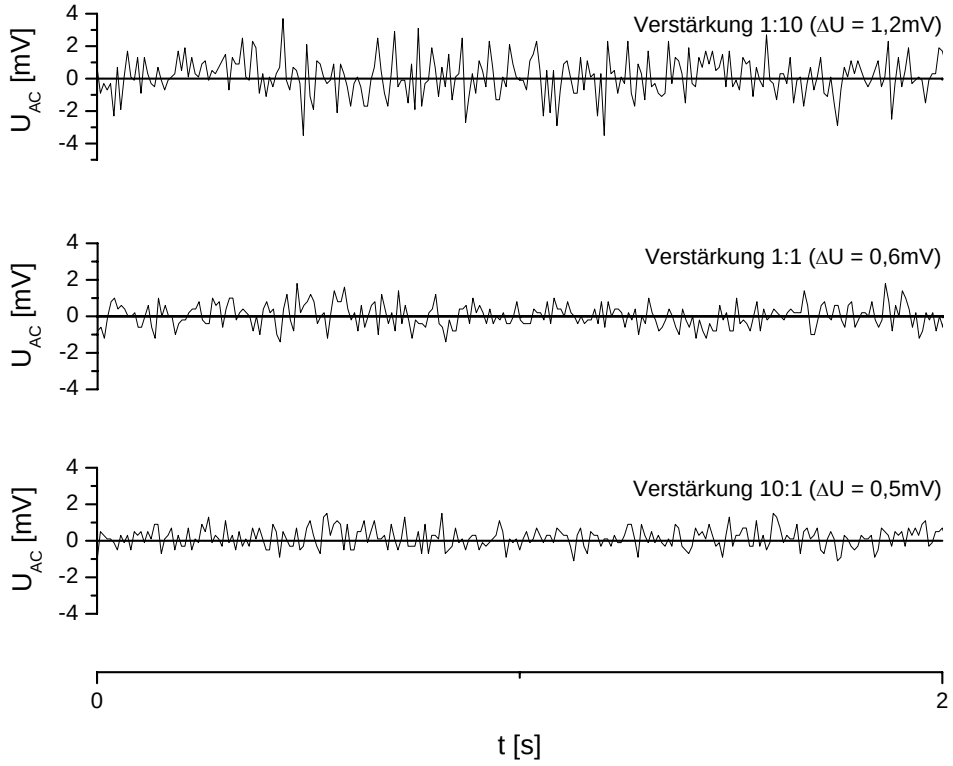


Abbildung 3.11: Rauschpegel des Hochspannungsverstärkers

Abbildung 3.11 zeigt den Rauschpegel der Ausgangsspannung des Hochspannungsverstärkers. Das mittlere Rauschen liegt bei abnehmender Verstärkung im Bereich von $1,2mV$ bis $0,5mV$. In Abbildung 3.12 wird das Ausgangsrauschen gegen den gewählten Ausgabebereich mit den entsprechenden Rauschwerten einiger kommerzieller Piezoansteuerungen verglichen. Mit Bauteilkosten von nur ca. 10 Euro pro Verstärkermodul liegt der Eigenbau auf der gleichen Ebene wie die zur Zeit besten kommerziellen Systeme. Ein System mit gleichem Rauschpegel und drei Verstärkermodulen der Firma *Createc* kostet im Verkauf ca. 16.000 *Euro*. Das Kontrollsystem *SPM 1000* von *RHK* gilt oft als Referenzsystem für Tunnelmikroskopsteuerungen. Die Hochspannungsverstärker dieser Elektronik liegen mit ihrem Rauschpegel sogar etwas über dem des Eigenbaus. Für ein Raumtemperatur-Tunnelmikroskop mit typischer Piezokonstante von $d_z = 4\frac{nm}{V}$ verursacht das elektronische Rauschen des Verstärkers ein Höhenrauschen von $< 2pm$. Für ein Tieftemperatur-Tunnelmikroskop wird dieser Wert durch die kleinere Piezokonstante noch einmal um eine Größenordnung kleiner.

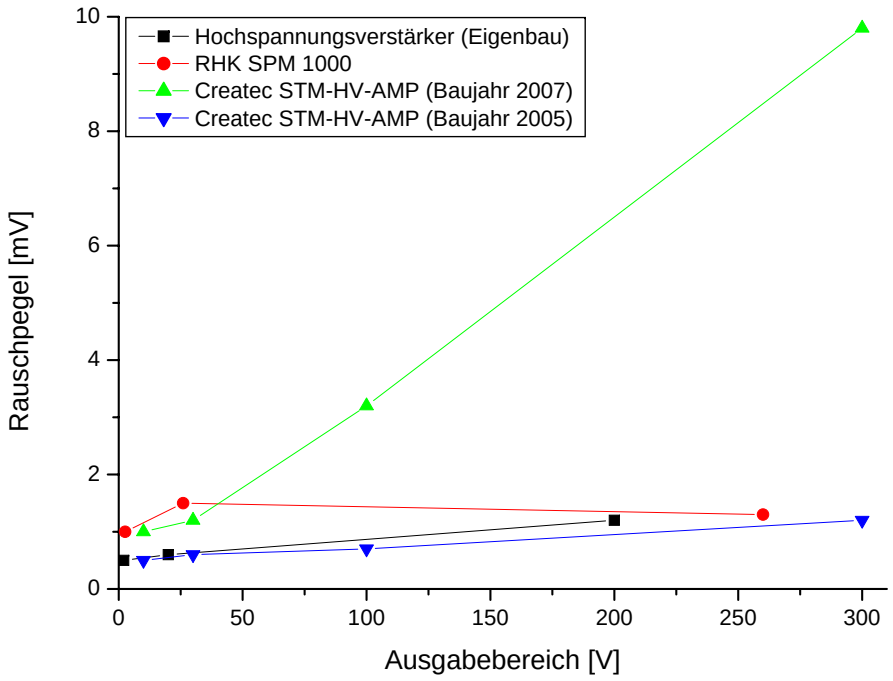


Abbildung 3.12: Vergleich der Rauschpegel verschiedener Hochspannungsverstärker

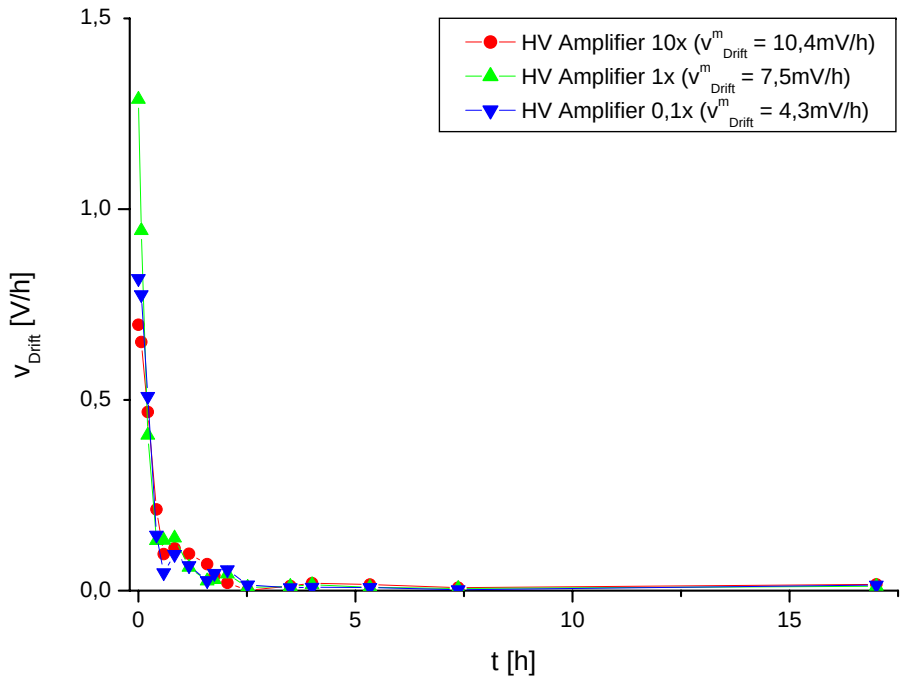


Abbildung 3.13: Elektronische Drift der Hochspannungsverstärker (v^m_{Drift} bezeichnet die mittlere Drift nach 3h)

Für Untersuchungen von dynamischen Prozessen mit dem Tunnelmikroskop werden oftmals Bildsequenzen eines bestimmten Ausschnitts der Probenoberfläche über längere Zeit aufgenommen. Während dieser Zeit muss die Tunnelspitze immer exakt über dem gewählten Probenbereich positioniert werden. Neben mechanischer Drift kann auch eine elektronische Drift der Ansteuerspannungen des Piezoscanners diese Positionierung beeinflussen. Die elektronische Drift des Hochspannungsverstärkers beruht vor allem auf der Temperaturänderung der einzelnen Bauteile des Verstärkers. Besonders kritisch ist die durch die Endstufe und die Konstantstromquelle eingeführte Spannungsdrift. Diese beiden Komponenten sind jeweils aus komplementären NPN- und PNP-Transistoren aufgebaut. Diese verursachen bei einer Temperaturänderung jeweils eine Spannungsdrift in positive bzw. negative Richtung (siehe [Tie1986]). Zur Verringerung der Spannungsänderung sind diese Transistoren jeweils paarweise auf eine Kühlschelle montiert. Erfahren sie nun dieselben Temperaturänderungen, gleichen sich die Spannungsverschiebungen der beiden Elemente auf Grund ihres entgegengesetzten Vorzeichens fast vollständig aus. Abbildung 3.13 zeigt eine Langzeitmessung der elektronischen Drift des Hochspannungsverstärkers über 18 Stunden bei unterschiedlichen Verstärkungsfaktoren. Nach drei Stunden Aufheizphase liegt die mittlere Drift zwischen $10,4\frac{mV}{h}$ und $4,3\frac{mV}{h}$. Dies führt bei einer Piezokonstante von $d_{x,y} = 4\frac{nm}{V}$ zu einer Ortsdrift von ca. $2\frac{\mathring{A}}{h}$. Bei einem typi-

schen Raumtemperatur-Tunnelmikroskop bleibt der Bildausschnitt also elektronisch pro Stunde auf einen Atomdurchmesser stabil. Aufgrund der geringeren Piezokonstante ist dieser Wert für ein Tieftemperaturmikroskop noch einmal kleiner.

Die gesamten Leistungsdaten der Echtzeitsteuerung sind im Anhang A in den Tabellen A.1 und A.2 zusammengefasst.

3.5 Schlussfolgerung

Es wurde gezeigt, dass ein Echtzeitrechner vom Typ *compactRIO* zusammen mit Hochspannungsverstärkern und Netzteilen aus Eigenentwicklung eine kostengünstige Plattform für ein flexibles Steuerungssystem für die Rastertunnelmikroskopie bietet. Die elektronischen Rauschpegel des Systems liegen im Bereich der besten kommerziellen Kontrolleinheiten. Größe, Gewicht und Leistungsaufnahme liegen sogar noch unter deren Werten.

Kapitel 4

Software der Echtzeitsteuerung

In diesem Kapitel wird auf die Software der Echtzeitsteuerung eingegangen. Sie dient nicht nur auf dem Computer des Benutzers zur Erfassung und Verarbeitung der Messdaten, sondern übernimmt auf dem Echtzeitrechner auch essentielle Steuerungsaufgaben wie die Höhenregelung der *STM*-Spitze und die Erzeugung der Scan-rampen. Damit sind Teile der Software direkt am eigentlichen physikalischen Messprozess beteiligt und die Qualität der Messungen hängt entscheidend von der Leistungsfähigkeit dieser Module ab.

Diese hardwarenahen Bereiche sind jedoch nur ein Teil des Aufgabenkatalogs, der an die Gesamtsoftware des Projektes gestellt wird. Die Forschung mit Rastersondenmikroskopen beruht oft darauf, mit dem Instrument in einem vorher aufwändig präparierten System nach den charakteristischen Fingerabdrücken der gesuchten physikalischen Prozesse zu fahnden. Oftmals finden sich in der Präparation neue, unerwartete Strukturen, die aber gleichwohl interessante Beiträge zur untersuchten Fragestellung leisten können und somit genau dokumentiert werden müssen. Hierbei kann die Zeit für eine Messung mehrere Stunden bis Tage umfassen. Wichtig ist daher, dass sich der Benutzer nicht vor dem Experiment auf eine bestimmte Art der Durchführung festlegen muss, sondern während der Messung einen einfachen und schnellen Zugriff auf alle Parameter des Mikroskop hat, um gegebenenfalls auf geänderte Zielsetzungen reagieren zu können. Weiterhin muss die Software über eine komfortabele Datenanzeige und -analyse verfügen, um einen Teil der Datenauswertung schon parallel zur Messung ausführen zu können. Dies erleichtert die weitere Planung des Vorgehens im Laufe des Experiments.

Eine Besonderheit der vorliegenden Echtzeitsteuerung ist, dass der Computer mit der Steuersoftware und die eigentliche Ansteuerung des Mikroskops mit dem Echtzeitrechner nur über Ethernet miteinander verbunden sind. Das Softwarekonzept muss daher die Möglichkeit einbeziehen, dass der Benutzerarbeitsplatz und das kontrollierte Instrument räumlich weit voneinander entfernt liegen. Auch können mehrere Benutzerarbeitsplätze ein Instrument kontrollieren oder mehrere Instru-

mente von einem Arbeitsplatz aus gesteuert werden.

Die gesamte Software des Projektes ist in der graphischen Programmiersprache *LabVIEW* von *National Instruments* umgesetzt. Als ursprünglich für den Laboralltag entwickelte Sprache bietet es schnelle Datenerfassung und -verarbeitung sowie umfangreiche Module zur wissenschaftlichen Datananalyse. Außerdem erleichtert der hohe Abstraktionsgrad von *LabVIEW* den engen Zeitplan des Projektes einzuhalten.

In Abschnitt 4.1 wird das Funktionsprinzip der Software im Detail vorgestellt. Besonders wichtig hierbei ist das Zusammenspiel der Software-Ebenen auf Anwender-Computer und Echtzeitrechner. Abschnitt 4.2 beschreibt Design und Funktionalität der Benutzeroberfläche. Danach werden die verwendeten Koordinatensysteme definiert (Abschnitt 4.3). Im Haupteil des Software-Kapitels folgt nun die Beschreibung der Software-Module auf dem Echtzeitrechner (Abschnitt 4.4), dem Anwender-Computer (Abschnitt 4.5) und deren Kommunikation untereinander über eine *Ethernet*-Schnittstelle (Abschnitt 4.6).

4.1 Konzept der Software

Wie in Abbildung 4.1 zu sehen ist, arbeitet die Software der Echtzeitsteuerung auf drei unterschiedlichen Hardwareebenen. Die erste Ebene ist der Anwender-Computer (*Host-PC*). Dieser ist ein handelsüblicher *PC* nach dem *x86*-Standard mit dem Betriebssystem *Windows 2000*, *Windows XP* oder *Windows VISTA*. Er besitzt von den drei Hardwareebenen am meisten Arbeitsspeicher und Rechenleistung. Sein Betriebsystem ist jedoch nicht deterministisch, d.h. eine genaue zeitliche Abfolge der verschiedenen Prozesse des Programms kann nicht garantiert werden, da das Betriebsystem die zur Verfügung stehende Arbeitszeit des Prozessors asynchron auf parallel laufende Anwendungen verteilt. Die zweite Ebene ist der Echtzeitrechner *compactRIO* von *National Instruments*. Er arbeitet unter dem Echtzeitbetriebsystem *LabVIEW Real-Time ETS*, das ebenfalls von *National Instruments* gestellt wird. Der Echtzeitrechner verfügt über weniger Rechenleistung und Arbeitsspeicher als der *Host-PC*, bietet dafür aber eine deterministische Ablaufsteuerung im Bereich von Mikrosekunden. Als letzte Ebene ist ein *Field-Programmable-Gate-Array* (*FPGA*) von *Xilinx* in den Echtzeitrechner eingebettet. Der *FPGA* bietet die Möglichkeit Teile des Programmcodes als Hardwareschaltung nachzubilden. Er besitzt so gut wie keinen eigenen Speicher und eine sehr begrenzte Rechenleistung, ermöglicht jedoch eine deterministische Ablaufsteuerung im Bereich von Nanosekunden. Auch in den verwendeten Datenformaten unterscheiden sich die drei Plattformen. Der *Host-PC* verwendet 64-bit Gleitkommazahlen [1], die mit einer physikalischen Einheit behaftet seien können. Der Echtzeitrechner benutzt ebenfalls 64-bit

[1] Eine 64-bit Gleitkommazahl kann rationale Zahlen von $-1,79 \cdot 10^{308}$ bis $+1,79 \cdot 10^{308}$ mit einer Geanuigkeit von 15 Stellen darstellen.

Gleitkommazahlen, kann jedoch nicht mit physikalischen Einheiten rechnen. Der *FPGA* ist in seinem Datenformat auf 16-bit *Integer* [2] beschränkt. Die Umrechnung der Gleitkommazahlen in für den *FPGA* lesbare *Integer*-Zahlen erfolgt auf dem *Host-PC*.

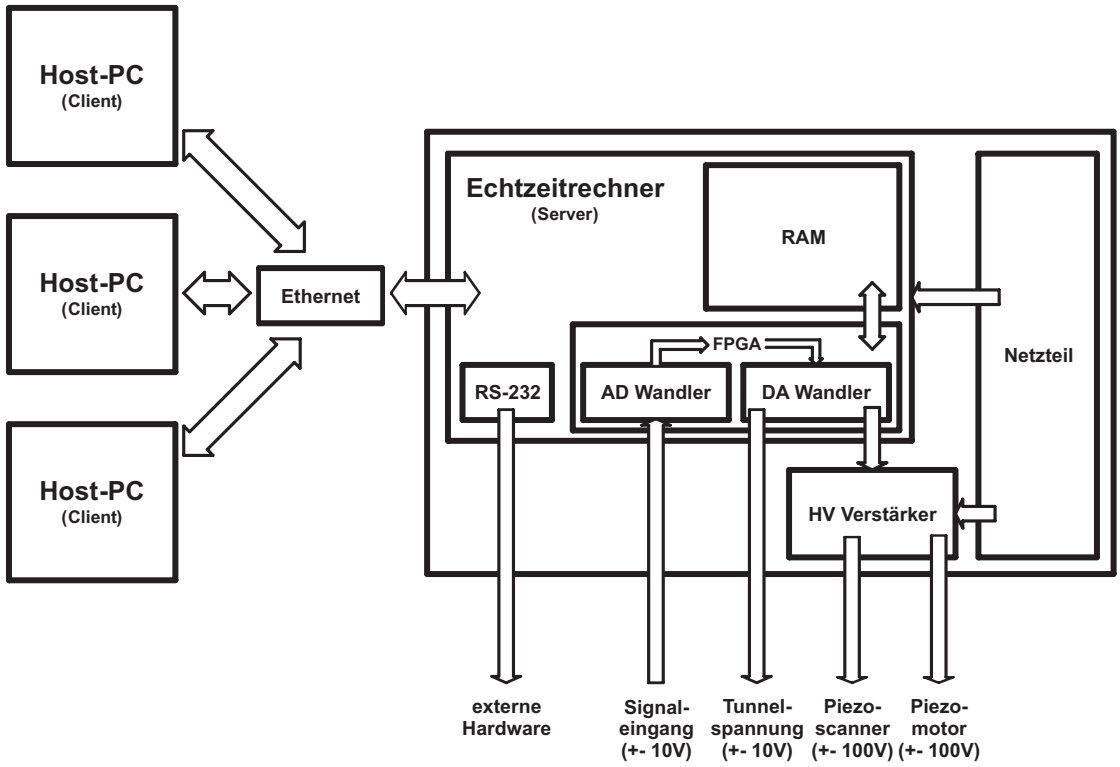


Abbildung 4.1: Hardwareebenen der Echtzeitsteuerung

Diesen Vorgaben folgend sind die rechenintensiven Aufgaben wie Aufzeichnen, Verarbeiten und Anzeigen der Bilddaten sowie die gesamte Verarbeitung der Benutzereingaben auf dem *Host-PC* implementiert. Die Prozesse zur Steuerung des Mikroskops und Erfassung der Messdaten laufen wegen ihrer höheren Timing-Anforderungen auf dem Echtzeitrechner. Hierbei sind die wirklich zeitkritischen Prozesse der Höhenregelung und Generierung der Scan-Rampen auf den *FPGA* ausgelagert.

Die Kommunikation zwischen *Host-PC* und Echtzeitrechner erfolgt über *Ethernet*. Der Echtzeitrechner stellt hierbei die Messdaten als Netzwerk-Server bereit, die sich der *Host-PC* als Netzwerk-Client abholen kann. Auf dem *Host-PC* werden dann die Daten in Bilddatensätze eingeordnet. Ein Bilddatensatz enthält jeweils den Vorwärts- und Rückwärtsscan über dem ausgewählten Gebiet der Probe in den drei Signalkanälen Höheninformation, Tunnelstrom und externem Signaleingang. Parallel hierzu läuft die Kontrollkommunikation, die den Betriebsmodus des Echtzeitrechners auswählt. Ohne Verbindung zum *Host-PC* bleibt der Echtzeitrechner

[2] Eine 16-bit *Integer*-Zahl kann ganze Zahlen von -32768 bis $+32768$ darstellen.

im letzten gewählten Betriebsmodus bis wieder eine neue Verbindung hergestellt wird. Nach einem Neustart lädt der Echtzeitrechner seinen Betriebsmodus von der lokalen Harddisk.

4.2 Benutzeroberfläche

Die Benutzeroberfläche des *Host-PC*'s ist die Schnittstelle zwischen dem Anwender und der Echtzeitsteuerung. Sie besteht aus sechs frei auf dem Desktop platzierbaren Fenstern (siehe Abbildung 4.2). Normalerweise ist die Benutzeroberfläche zum Betrieb auf zwei oder mehr Monitoren gedacht, kann jedoch auch auf Arbeitsplätzen mit nur einem Monitor ausgeführt werden.

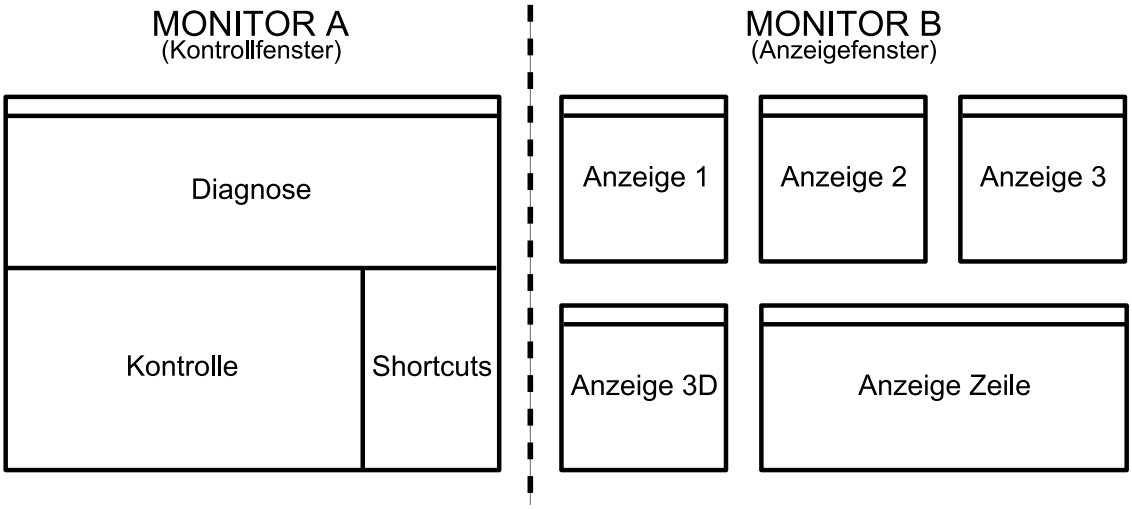


Abbildung 4.2: Konzept der Benutzeroberfläche

In der Standardkonfiguration zeigt *Monitor A* das Kontrollfenster. *Monitor B* beinhaltet alle Fenster zur Datenanzeige. Bis auf das Kontrollfenster sind alle Anzeigefenster frei skalierbar. Die jeweilige Fensterkonfiguration mit Größe und Position kann von der Software gespeichert und geladen werden. So sind verschiedene Fensteraufteilungen für verschiedene Anwender bzw. Arbeitsschritte möglich.

4.2.1 Kontrollfenster

Abbildung 4.3 zeigt einen Screenshot des Kontrollfensters. Das Kontrollfenster teilt sich in drei Hauptbereiche: *Diagnose*, *Kontrolle* und *Shortcuts*. Der Diagnosebereich bietet dem Benutzer einen ständigen Überblick über alle dynamischen Parameter des Mikroskops. So werden die Position der Scan-Spitze, die Grenzen des aktuellen Scan-Bereichs und die Werte für den Tunnelstrom und den Tunnelstrom-Setpoint

angezeigt. Weiterhin wird der zeitliche Verlauf der Höhenregelung und des Tunnelstroms sowie deren Frequenzspektrum dargestellt. Diese Anzeigen ersetzen das sonst übliche Oszilloskop an einem Tunnelmikroskopiearbeitsplatz.

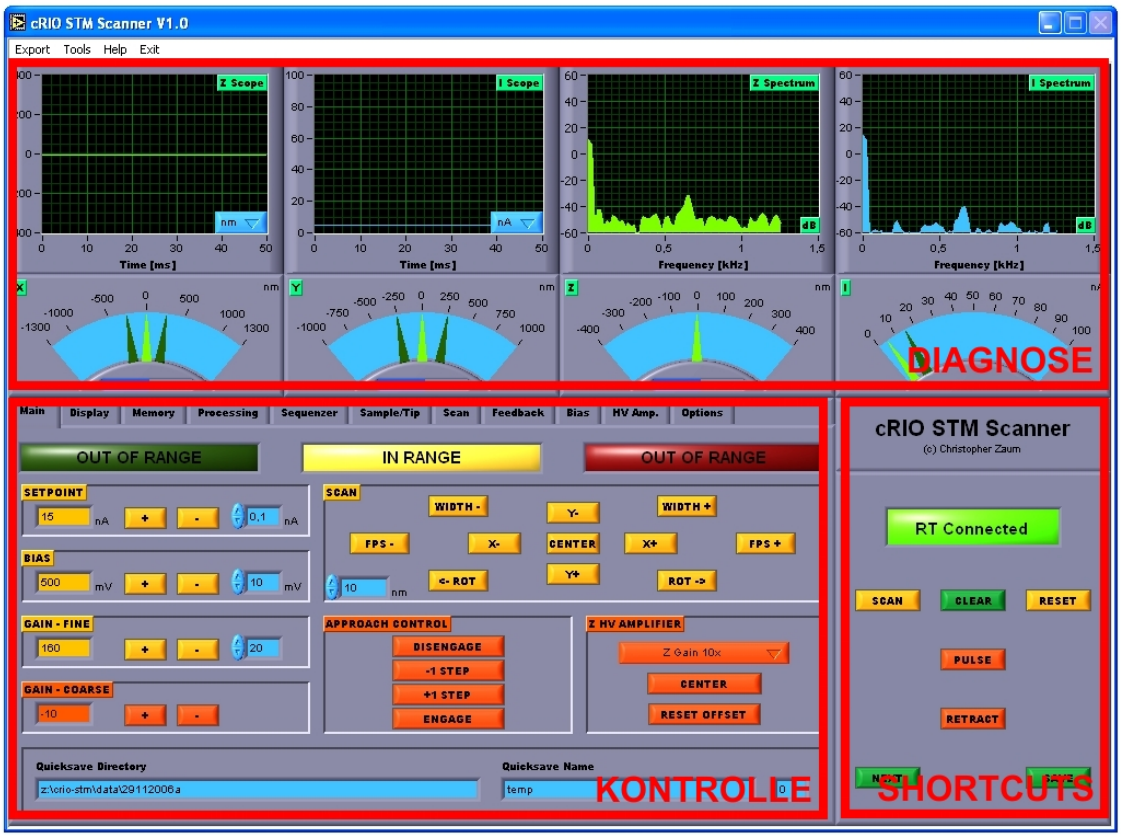


Abbildung 4.3: Screenshot des Kontrollfensters

Über den Kontrollbereich werden alle Instrumentenparameter und die Darstellungs- bzw. Analysefunktionen der Software gesteuert. Über ein Hauptfenster hat der Benutzer Zugriff auf die üblichsten Optionen, alle weiteren Einstellungen werden über Unter-Menüs vorgenommen. Ein besonderer Bereich mit den instrumentspezifischen Voreinstellungen kann mit einem Passwort gegen ungewollte Veränderungen geschützt werden.

Der Bereich mit den Shortcuts beinhaltet Funktionen, die der Anwender zu jeder Zeit verfügbar haben sollte. Dazu zählen *Scan starten*, *Scan zurücksetzen*, *Scan löschen*, *Spitze zurückziehen*, *Spannungspulse anlegen* und *Aktuellen Scan speichern*.

4.2.2 Bildfenster

Die Benutzeroberfläche besitzt drei frei skalierbare Bildfenster, die jeweils den aktuellen oder einen gespeicherten Bilddatensatz anzeigen können.

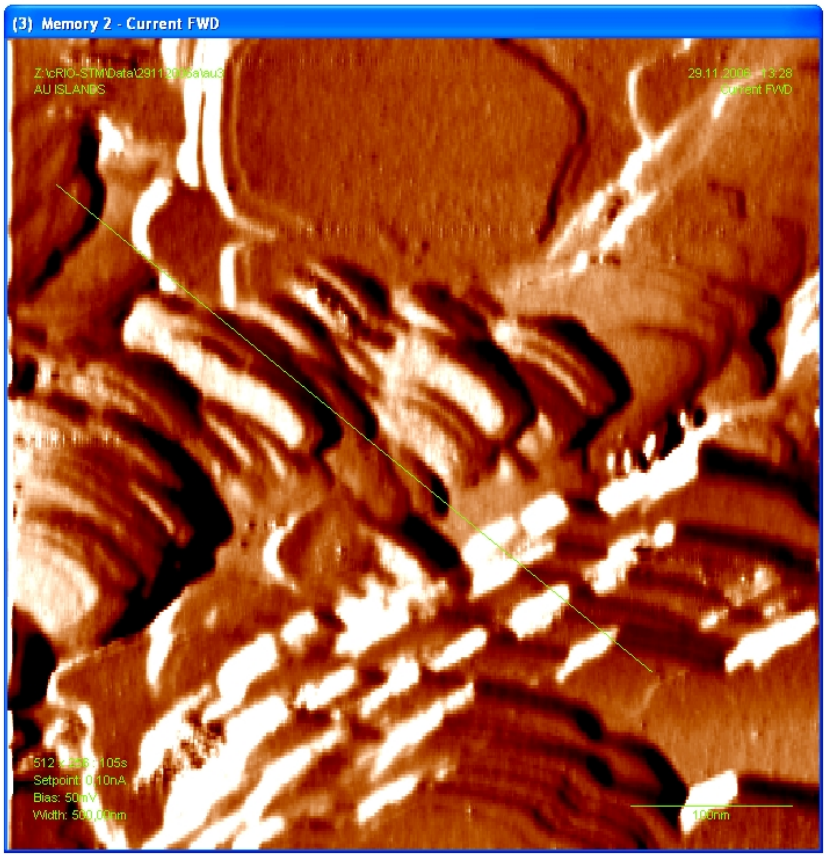


Abbildung 4.4: Screenshot des Bildfensters (Datensatz: Goldinseln auf Silizium)

In das Bildfenster wird auf Wunsch ein *On-Screen-Display* (*OSD*) eingeblendet, das Informationen über den angezeigten Datensatz enthält (Abbildung 4.4 links unten). Hierzu zählen Angaben über Dateinamen, Datum, Uhrzeit, Scan-Bereich, Scan-Geschwindigkeit, Position der Scan-Spitze, Tunnelspannung und Tunnelstrom-Setpoint. Außerdem kann in dem *OSD* wahlweise ein Rechteck angezeigt werden, das die relative Position des aktuellen Scanbereiches gegenüber eines vorherigen Scanbereiches oder die relative Position des Datensatzes eines anderen Bildfensters angibt.

4.2.3 Zeilenfenster

Das Zeilenfenster erlaubt die Darstellung einzelner Höhen-Scanzeilen $z(x')$ oder Tunnelstrom-Scanzeilen $I(x')$. (Abbildung 4.5) Wahlweise wird die aktuelle Zeile oder ein Schnitt durch einen gespeicherten Datensatz angezeigt.

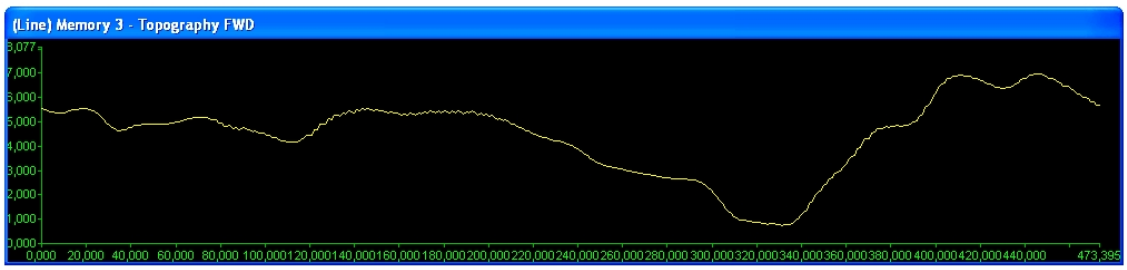


Abbildung 4.5: Screenshot des Zeilenfensters (Höhenprofil aus Abbildung 4.4)

4.2.4 *3D*-Fenster

In den Bildfenstern wird die Information $z(x', y')$ oder $I(x', y')$ als Farbskala über der Bildfläche angezeigt. Das *3D*-Fenster zeigt diese Daten als Fläche im dreidimensionalen Raum an (Abbildung 4.6). Hierbei kann der Standort des Beobachters bzw. die Richtung der Beleuchtung frei gewählt werden. Die Berechnung der *3D*-Darstellung erfolgt in Echtzeit, d.h. sie kann schon während der Aufnahme eines Scans mitlaufen.

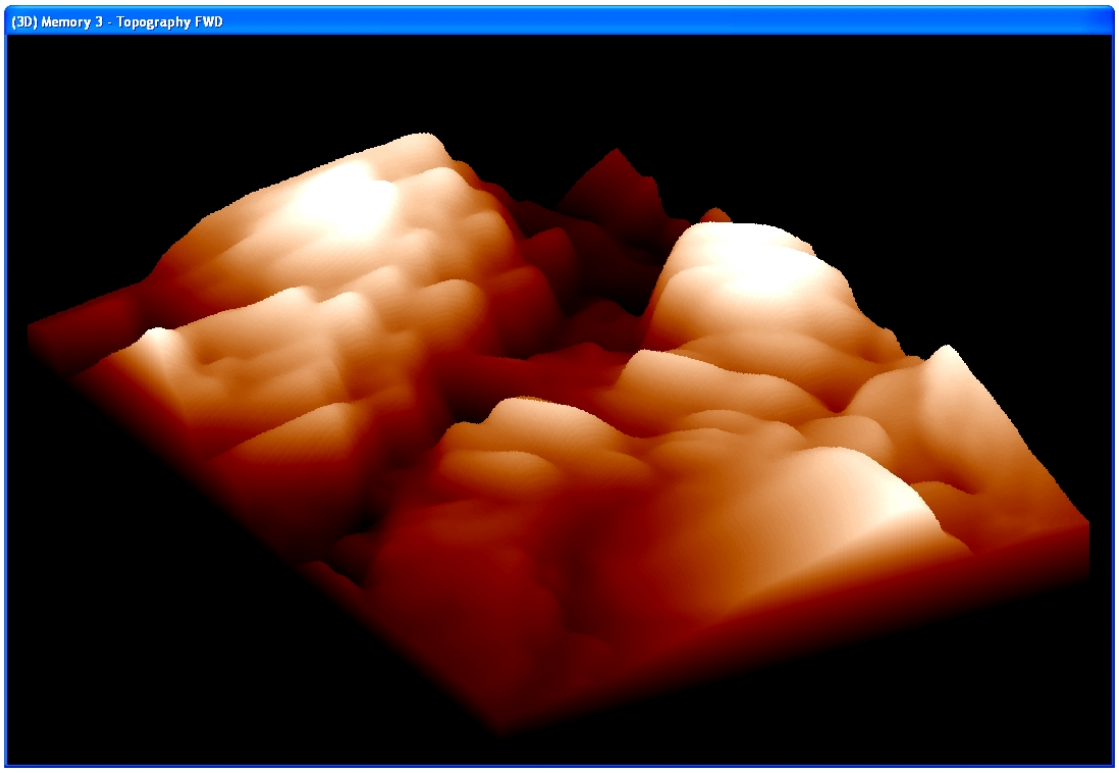


Abbildung 4.6: Screenshot des 3D-Fensters (Datensatz: Goldinseln auf Silizium)

4.3 Koordinatensysteme

Innerhalb der Echtzeitsteuerung gibt es zwei natürliche Koordinatensysteme: Weltkoordinaten (x, y) und Bildkoordinaten (x', y') (Abbildung 4.7A). Die Weltkoordinaten werden durch die Parameter des Piezoscanners vorgegeben. Alle Steuerbewegungen der Scanspitze beziehen sich auf das Weltkoordinatensystem.

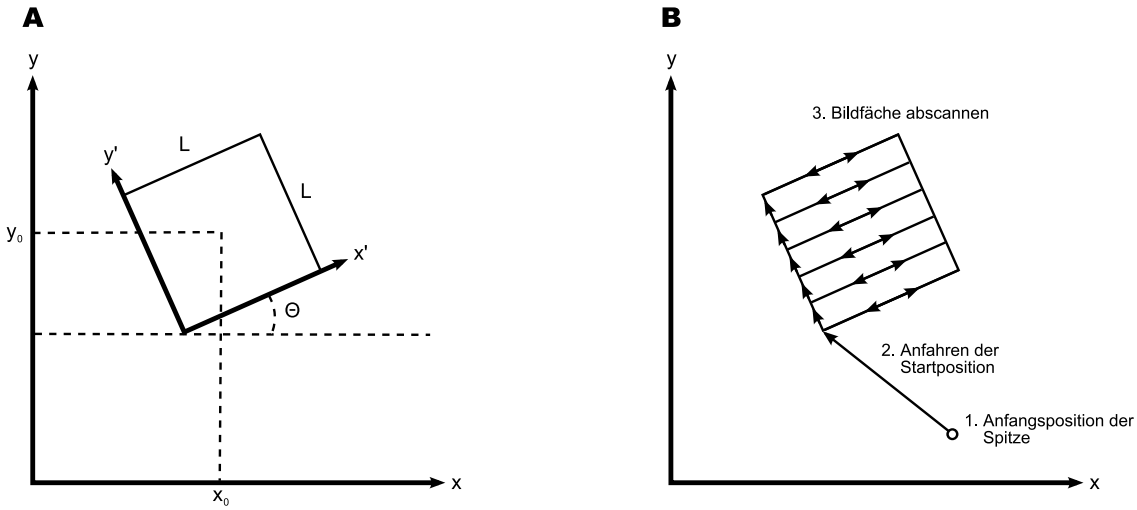


Abbildung 4.7: A) Umrechnung zwischen Welt- und Bildkoordinatensystem B) Ablauf des Bildaufbaus

Die Bildkoordinaten werden durch die Begrenzungen des aktuellen Scan-Bereiches festgelegt. Alle Messungen innerhalb eines Datensatzes und die Bildanzeige beziehen sich auf das Bildkoordinatensystem.

Die Beziehung zwischen den beiden Koordinatensystemen wird durch die Verschiebung (x_0, y_0), den Drehwinkel Θ und die Größe L des Scan-Bereiches festgelegt.

$$x = (x' - \frac{L}{2}) \cos\Theta - (y' - \frac{L}{2}) \sin\Theta + x_0 \quad (4.1)$$

$$y = (y' - \frac{L}{2}) \cos\Theta + (x' - \frac{L}{2}) \sin\Theta + y_0 \quad (4.2)$$

Zu jedem Bilddatensatz werden diese Werte für spätere Umrechnungen zwischen den Koordinatensystemen gespeichert.

4.4 Prozesse des Echtzeitrechners

Auf dem Echtzeitrechner arbeiten folgende Prozesse parallel (siehe Abbildung 4.8)

- Erzeugen der Scanrampen
- Steuerung der Höhenregelung
- Einstellen der Tunnelspannung
- Ansteuerung der Hochspannungsverstärker
- Steuerung der Grobannäherung
- Kontroll- und Datenkommunikation

Diese Prozesse laufen in voneinander unabhängigen Schleifen, die ihre Betriebsdaten alle aus der Variablen *Transfer Variables* beziehen. Die Kontrollkommunikation empfängt einen Kontrolldatensatz vom *Host-PC*, der einem bestimmten Betriebsmodus entspricht und schreibt diesen in die Variable *Transfer Variables*. Die separaten Prozesse zur Steuerung des Mikroskops lesen ihre Betriebsart wiederum aus dieser Variablen aus und stellen sich so auf den Betriebsmodus ein.

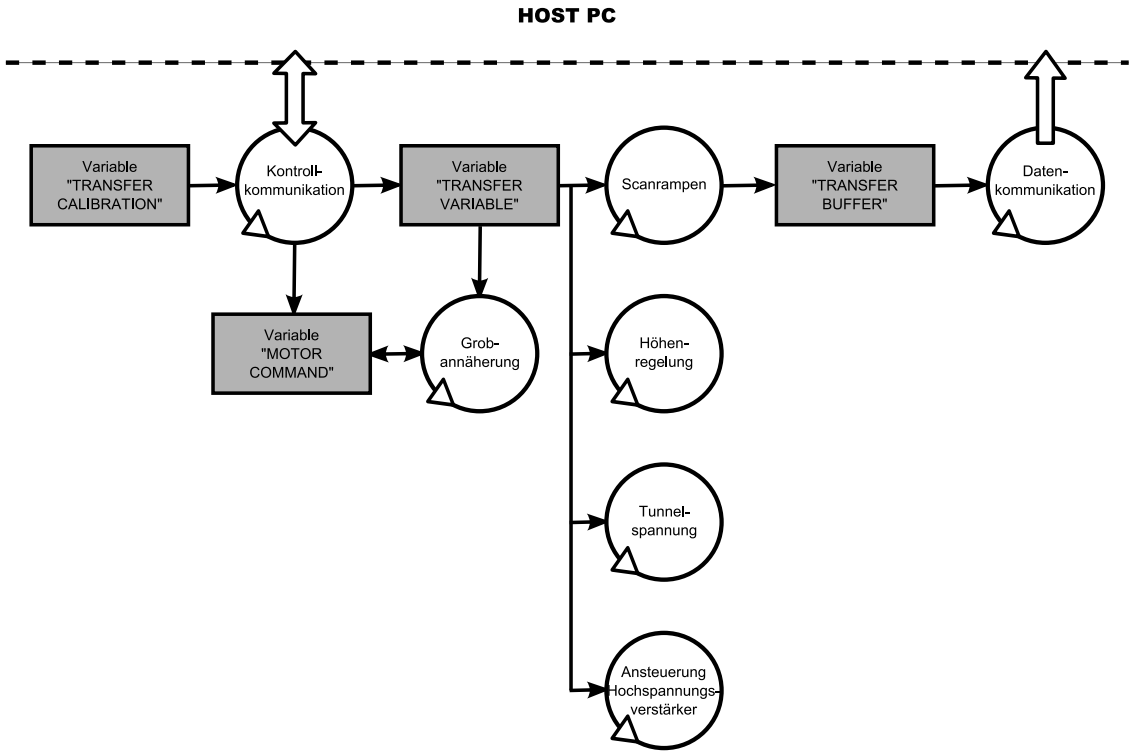


Abbildung 4.8: Datenstruktur des Echtzeitrechners

Diese Vorgehensweise über eine globale Variable hat den Vorteil, dass die einzelnen Schleifen nicht auf einen generellen Kontrolltakt warten müssen und so schneller

ausgeführt werden können. Besonders Verzögerungen in der Netzwerkkommunikation wirken sich so nicht auf die nachfolgenden Prozesse aus. Genauso werden die erfassten Messdaten nicht sofort über das Netzwerk versendet, sondern über die Variable *Transfer Buffer* an die Datenkommunikation übergeben. Die Grobannäherung wird zusätzlich über die Variable *Motor Command* gesteuert, in der der zur Verfügung stehende Befehlssatz für die Motorsteuerung vom Host-PC bereit gestellt wird. Die Variable *Transfer Calibration* speichert die bei Programmstart ausgelesenen Kalibrierungsdaten der DA- und AD-Wandler und gibt diese über die Kontrollkommunikation an den *Host-PC* weiter.

4.4.1 Höhenregelung

Ein Tunnelmikroskop bezieht seine Informationen über die Probenstruktur aus dem Zusammenhang zwischen dem Abstand der Tunnelspitze zur Probe d und dem dabei fließendem Tunnelstrom I_{ist}.

$$I_{ist} \propto e^{-2k_0 d} \tag{4.3}$$

Dies kann auf zwei unterschiedliche Arten geschen. Im *Constant-Heigth*-Modus wird die Messspitze durch eine Auslenkung Z des Z-Piezos auf einen bestimmten Abstand d zur Probe gebracht und danach die Veränderung des Tunnelstrom ΔI bei lateralen Scanbewegungen der Messspitze aufgezeichnet. Die Tunnelstromänderung $\Delta I(x', y')$ ist ein Maß für die Höhenänderung der Probe. Im *Constant-Current*-Modus wird die Tunnelspitze während der lateralen Scanbewegung so in ihrer Höhe nachgeregelt, dass der gemessene Tunnelstrom konstant bleibt. Die Höhenänderung der Messspitze $Z(x', y')$ ist dann ein Maß für die Höhendifferenzen der Probe. Natürlich kann das Mikroskop durch eine geeignete Dämpfung der Höhenregelung in einer Mischung aus diesen beiden Modi betrieben werden.

Zur Höhenregelung im *Constant-Current*-Modus benutzt die Echtzeitsteuerung einen digitalen *PID*-Regler. Aus dem Eingangssignal I_{ist} wird über folgende Rekursionsformel die Stellgröße Z für einen konstanten Stromwert I_{soll} ermittelt.

$$\begin{aligned} Z(n+1) \;=\; & \underbrace{C \cdot P_{gain}\left[I_{soll}(n) - I_{ist}(n)\right]}_{Proportionalteil} + \underbrace{C \cdot I_{gain} \sum_{i=m}^{m+n} \left[I_{soll}(i) - I_{ist}(i)\right]}_{Integralteil} \\ & + \underbrace{C \cdot D_{gain}\left[I_{ist}(n) - I_{ist}(n-1)\right]}_{Differentialteil} \end{aligned} \tag{4.4}$$

Wie in Abbildung 4.9 schematisch dargestellt ist, setzt sich der Regler aus drei Teilgliedern zusammen. Der Proportionalteil (P-Glied) erhöht oder erniedrigt die

Stellgröße Z proportional zur Abweichung des Systems vom Sollsignal gewichtet mit dem Faktor P_{gain}. Der Integralteil (I-Glied) bestimmt den Stellwert Z durch zeitliche Integration der Regelabweichung mit Gewichtung durch den Faktor I_{gain}. Die Sprungantwort des I-Gliedes ist ein linearer Anstieg. Das heißt, bei einer konstanten Regelabweichung vergrößert sich das Integral und somit verstärkt sich dieser Anteil. Der Differentialteil (D-Glied) bestimmt die Stellgröße Z aus der zeitlichen Ableitung der Regelabweichung gewichtet mit dem Faktor D_{gain}. Bei konstanter Regelabweichung ist dieser Anteil gleich null. Der Vorfaktor C bietet die Möglichkeit die Gewichtungsfaktoren der einzelnen Regelglieder auf einen bestimmten Wertebereich voreinzustellen.

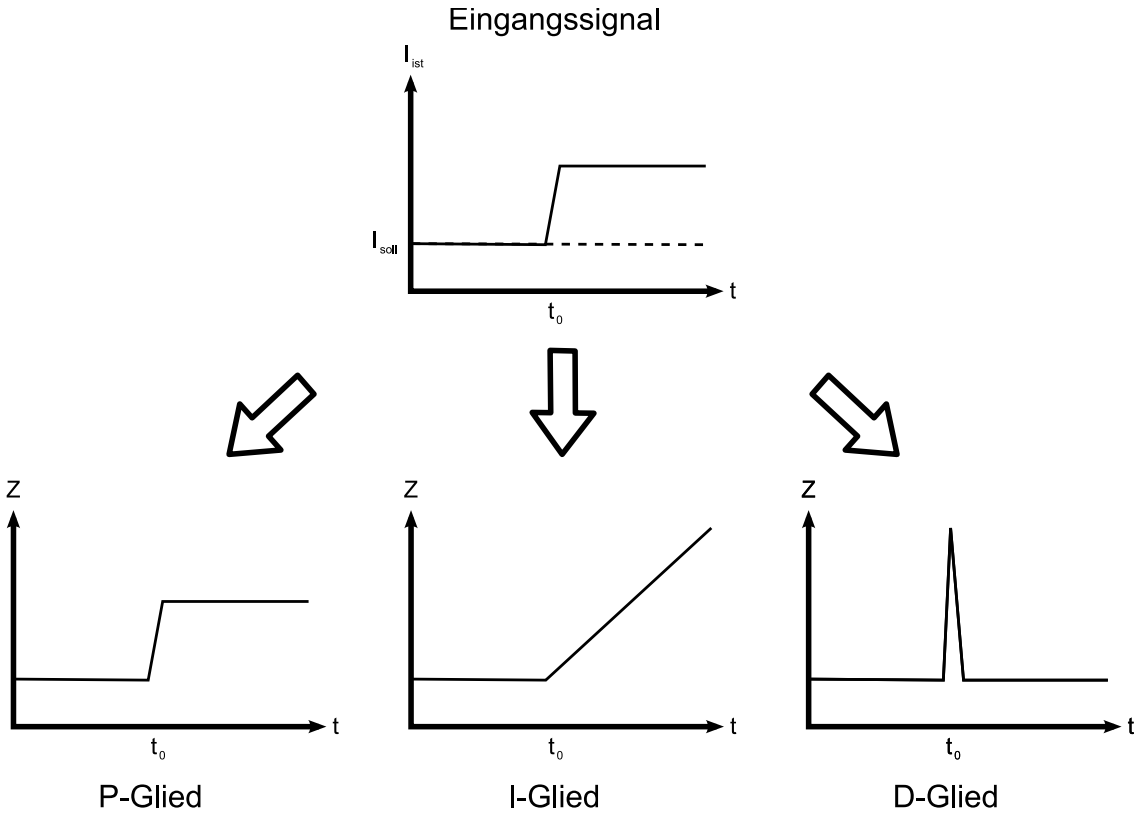


Abbildung 4.9: Sprungantwort des P-, I-, und D-Gliedes

Um der exponentiellen Abhängigkeit des Tunnelstroms I_{ist} von dem Spitzenabstand d Rechnung zu tragen, verwenden viele Tunnelmikroskope für die Höhenregelung statt des Eingangssignals I_{ist} dessen natürlichen Logarithmus $\ln(I_{ist})$. Die Echtzeitsteuerung bietet hier die Möglichkeit den *PID*-Regler sowohl mit linearem Eingang als auch mit logarithmiertem Eingang zu betreiben. Weiterhin kann vor den Regler ein *Lowpass*-Filter geschaltet werden, um Einflüsse hochfrequenter Störsignale zu minimieren.

Abbildung 4.10 zeigt die Implementierung der Regelschleife. Um einen fehlerfreien Betrieb und höchste Reaktionszeiten zu ermöglichen, ist diese als geschlossener

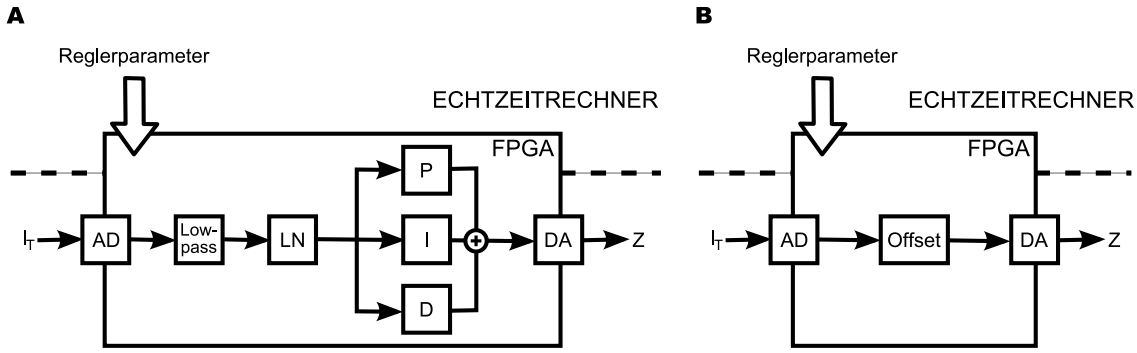


Abbildung 4.10: Ablauf der Höhenregelung bei A) eingeschaltetem Regelkreis B) ausgeschaltetem Regelkreis

Regelkreis direkt auf dem *FPGA* untergebracht. Die einzige Kommunikation mit dem Echtzeitrechner erfolgt bei einer Änderung der Reglerparameter. Ansonsten wird die Höhenregelung von allen anderen Prozessen unabhängig auf dem *FPGA* ausgeführt. Die maximale Sampling-Rate beträgt hierbei $100kHz$.

Das *Bode*-Diagramm (siehe [Bec1998] und Abbildung 4.11) gibt Aufschluss über den Frequenzgang des *PID*-Reglers bei verschiedenen Einstellungen des Vorfaktors C. Größere Werte von C bedeuten eine schnellere Reaktion des Reglers. Bei Einstellungen von $C \geq 1$ reagiert der Regler ohne Verzögerungen auf Signale mit einer Frequenz $\leq 10kHz$. In diesem Bereich ist die Reglergeschwindigkeit nur durch die maximale Samplingrate der Schleife begrenzt. Die theoretische, durch das *Nyquist-Shannon-Abtasttheorem* [3] (siehe [Sha1949]) festgelegte, Grenzfrequenz von

$$f_{max} = \frac{f_{sampling}}{2} = 50kHz \tag{4.5}$$

wird hier fast erreicht. Bei Werten von $C \leq 1$ wird eine zusätzliche Dämpfung in den Regelkreis eingeführt. Für $C \leq 3 \cdot 10^{-5}$ müssen schon Frequenzen $\leq 50Hz$ erhebliche Verluste hinnehmen. Das Mikroskop arbeitet in diesem Bereich praktisch im *Constant-Heigth*-Modus. Ein typischer Wert für Betrieb im *Constant-Current*-Modus ist $C = 0,02$. Hier setzt die Dämpfung der Höhenregelung bei ca. $1kHz$ ein.

4.4.2 Erzeugung der Scanrampen

Neben der Höhenregelung ist die Erzeugung der Scanrampen der für die Qualität der Messergebnisse entscheidende Schritt. Wie in Abbildung 4.7B zu sehen ist, besteht der Bildaufbau aus zwei Schritten. Als erstes wird die Startposition des Bildes angefahren, danach der Bildbereich von der Spitze kontinuierlich abgerastert. Für

[3] Das Nyquist-Shannon-Abtasttheorem besagt, dass ein Signal nur dann digital aufgelöst werden kann, wenn die Abtastfrequenz mindestens doppelt so hoch ist wie die Frequenz des Signals.

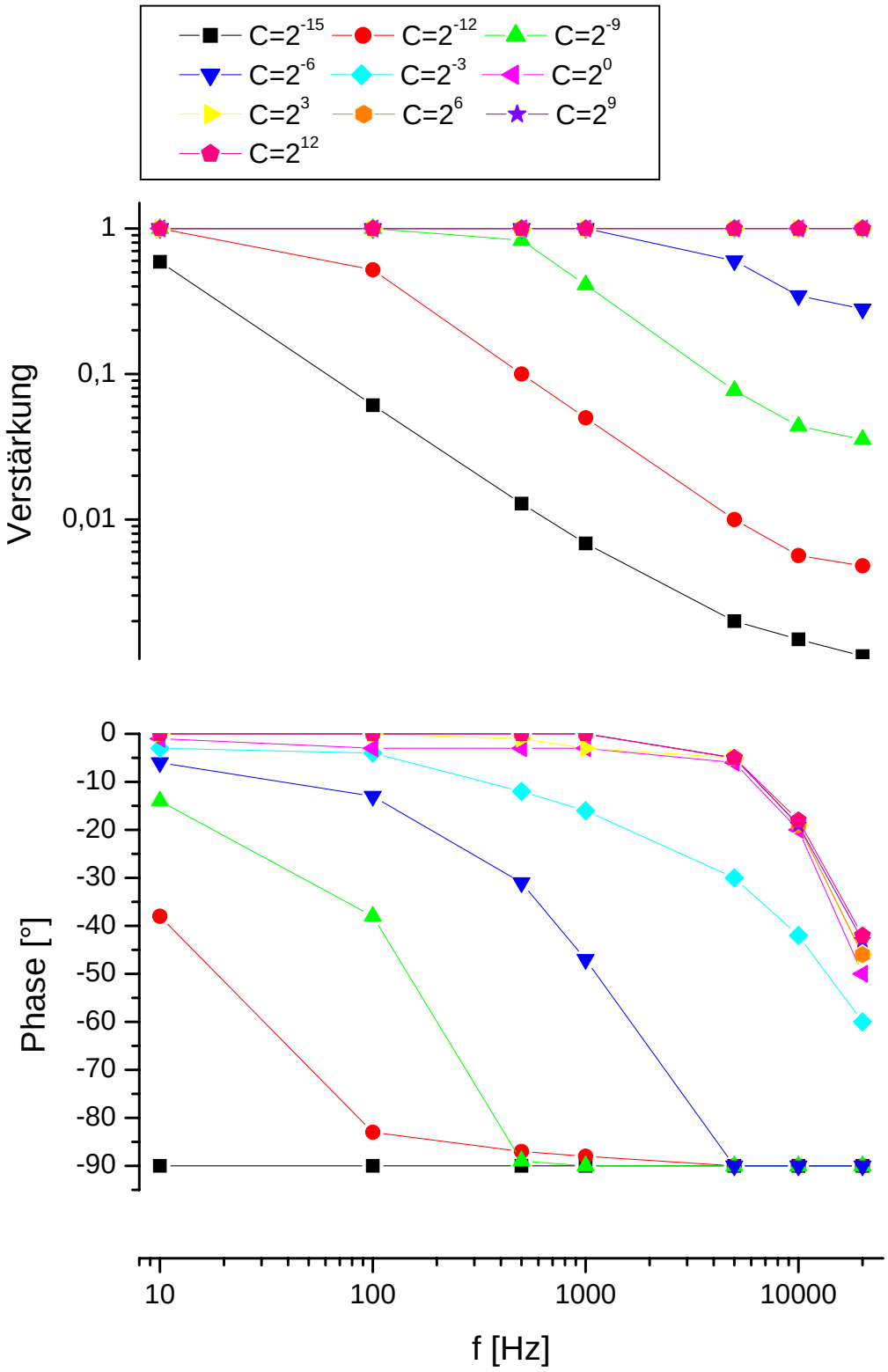


Abbildung 4.11: BODE-Diagramm der Höhenregelung bei 100kHz Samplingrate

dieses Abrastern der Probe wird ein schneller Scan in X-Richtung und ein langsamer Scan in Y-Richtung benötigt (Abbildung 4.12A). Der schnelle Scan besteht aus drei sich wiederholenden Abschnitten, die zusammen eine Zeile des Bildes aufbauen. Zuerst wird die Hochspannung am Piezo-Scanner erhöht, um eine Auslenkung in positive X-Richtung zu erhalten. Danach wird die Spannung wieder erniedrigt, um zur Startposition der Zeile zurückzukehren. Die Erzeugung der Spannungsrampen erfolgt hierbei nicht kontinuierlich sondern schrittweise. Die Anzahl der Schritte hängt vom gewählten Bildformat ab. Wird zum Beispiel ein Bild mit 512 x 256 Bildpunkten (*Pixeln*) abgetastet, so ist die Rampe in X-Richtung in 512 Schritte unterteilt, die Rampe in Y-Richtung hingegen nur in 256. Während der schrittweisen Bewegung der Tunnelspitze über der Probe wird nach jedem Schritt der Spitze Höhenwert und Tunnelstromwert gemessen und als Zeile des Vorwärts- bzw. Rückwärts-Scan in einem temporären Zwischenspeicher abgelegt. Nach Rückkehr zum Zeilenanfang werden die Messdaten der Zeile aus diesem Speicher ausgelesen. Während des Datentransfers erfolgt keine Bewegung der Tunnelspitze.

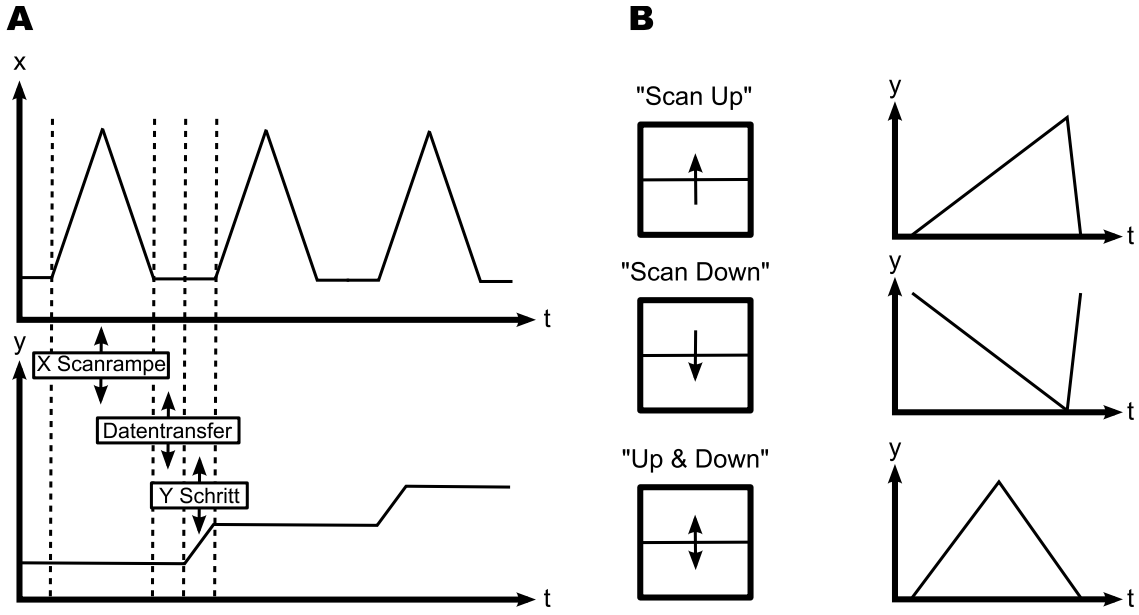


Abbildung 4.12: A) Scanrampen für $\Theta = 0°$ B) Y-Scanrampen für verschiedene Scanrichtungen

Ein Schritt in die langsame Y-Scanrichtung erfolgt am Ende jeder Bildzeile. Pro Bild erfolgt nur eine Auslenkung in dieser Richtung. Diese Auslenkung endet mit einer schnellen Bewegung der Spitze zur Ausgangsposition des Bildes oder dem Aufbau eines zweiten Bildes in die entgegengesetzte Richtung (Abbildung 4.12B). Ein Bildaufbau immer in derselben Richtung hat den Vorteil, dass die Tunnelspitze die Probe bei jedem Abrastern der Bildfläche gleichartig abbildet. Bei einer Kombination von Aufwärts- und Abwärtsbewegung der Spitze können sich die Bilder der unterschiedlichen Scanrichtungen auf Grund von Piezocreep und unterschiedlichem Ansprechen der Höhenregelung unterscheiden, durch die symmetrische Scanrampe

in Y-Richtung wird jedoch das Driften des Piezo-Scanners in den Umkehrpunkten minimiert. Stehen die Achsen des Bildkoordinatensystems nicht parallel ($\Theta = 0°$) zu den Achsen des Weltkoordinatensystems, müssen die benötigten Scanrampen über die in Abschnitt 4.3 diskutierten Koordinatentransformationen umgerechnet werden.

Abbildung 4.13 veranschaulicht das Erfassen einer Scanzeile im Detail. Der Echtzeitrechner überprüft die aktuelle Position der Spitze und fährt gegebenenfalls die Startposition der aktuellen Zeile an. Danach werden die erforderlichen Koordinatentransformationen durchgeführt und die Spannungswerte in X-, und Y-Richtung für den Schritt zum nächsten Pixel der Scanzeile berechnet. Zusammen mit der Messdauer pro Pixel (*Clock*) werden diese Daten an den *FPGA* übergeben. Die Erfassung des Vorwärts-Scans erfolgt nun autonom auf dem *FPGA*. Nach jedem Schritt der Tunnelspitze über die Probe werden die Höhenwerte, Tunnelstromwerte und Werte eines externen Signals aufgezeichnet. Hierbei besteht die Möglichkeit für die einem Pixel zugeordneten Daten den Mittelwert beliebig vieler Einzelmessungen zu verwenden. Zusammen mit der aktuellen X-, und Y-Position sowie der aktuellen Messzeit werden die Messwerte vom *FPGA* über einen *DMA*-Zugriff [4] in den Hauptspeicher des Echtzeitrechners geschrieben. Ohne eine Auslagerung in den Hauptspeicher des Echtzeitrechners verfügt der *FPGA* nicht über genügend eigenen Speicher um die Messdaten einer Scan-Zeile zu verwalten. Nach Ablauf des Vorwärts-Scans werden die Schrittwerte vom Echtzeitrechner invertiert und wieder an den *FPGA* übergeben. Auf dem *FPGA* erfolgt nun die Erfassung des Rückwärts-Scans auf die zuvor beschriebene Weise. Nach Abschluss der Scan-Rampen werden die erzeugten Messdaten vom Echtzeitrechner ausgelesen, mit der entsprechenden Zeilennummer versehen und gemeinsam in einen *FIFO*-Buffer [5] verschoben. Aus diesem Zwischenspeicher werden die Datenpakete von dem Prozess zur Netzwerkkommunikation entnommen. Der Zwischenspeicher dient dazu eventuelle Leistungsschwankungen der Netzwerkkommunikation aufzufangen. Im Fall einer Verlangsamerung der Kommunikation (z.B. durch erhöhtes Datenaufkommen an einem Netzwerkknoten) beginnt sich der *FIFO*-Buffer zu füllen und die Abtastung der Probe läuft ohne Verzögerungen weiter.

4.4.3 Kontrolle der Grobannäherung

Um Tunnelspitze und Probe auf einen Abstand zu bringen, der innerhalb des Bewegungsbereiches des Piezo-Scanners liegt, benutzen fast alle Tunnelmikroskope

[4] Der Begriff *Direct-Memory-Access* (*DMA*) oder auch Speicherdirektzugriff bezeichnet eine Kommunikationsart mit Hilfe derer ein Peripheriegerät direkt, ohne Umweg über den Prozessor, auf den Hauptspeicher eines Rechners zugreifen kann. Diese Kommunikation ist erheblich schneller als ein normaler Speicherzugriff.

[5] *First-In-First-Out* (*FIFO*) bezeichnet ein Speicherungsverfahren bei dem die zuerst gespeicherten Elemente auch wieder zuerst dem Speicher entnommen werden.

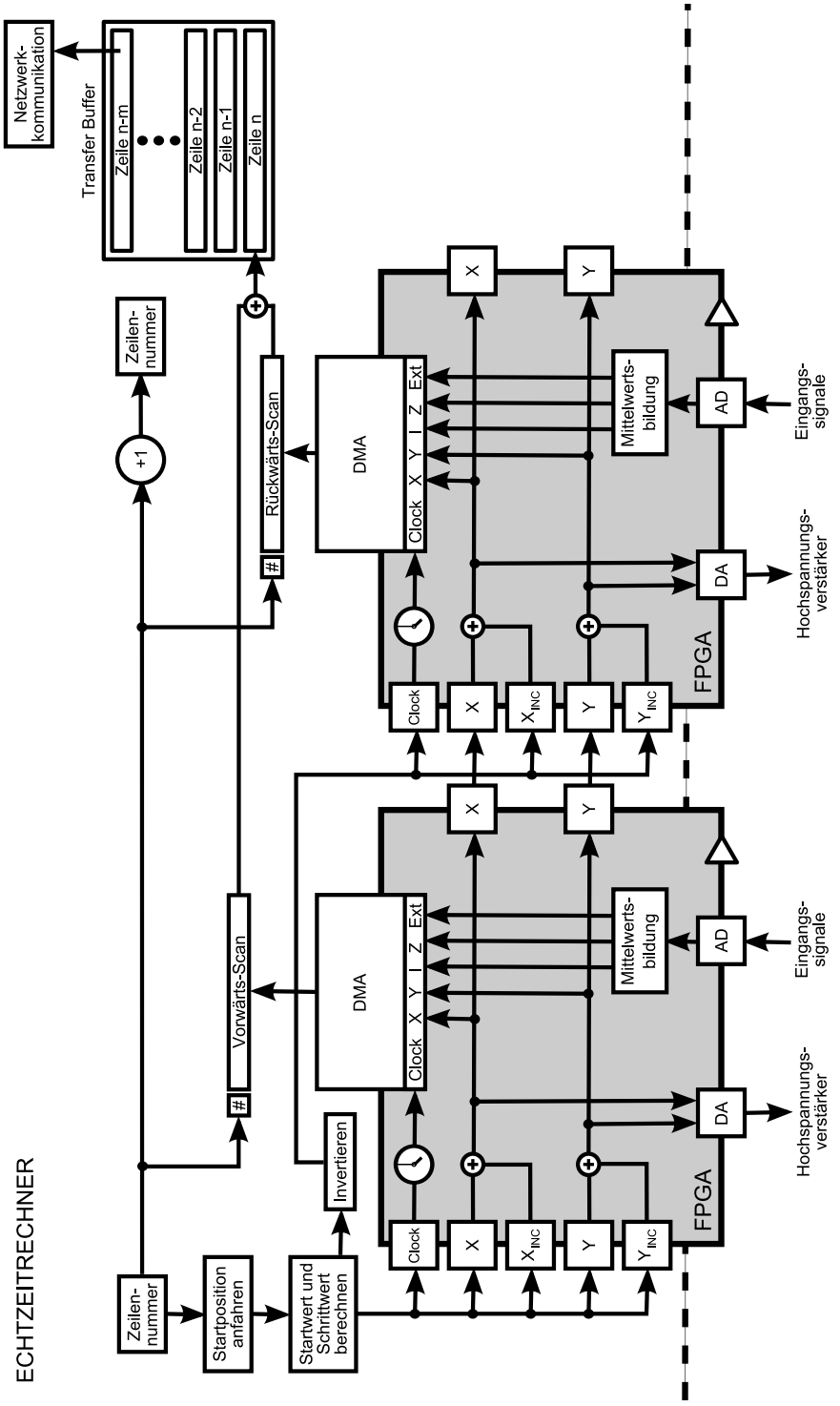


Abbildung 4.13: Ablauf der Erfassung einer Scanzeile

einen zweiten Antrieb in Z-Richtung zur Grobannäherung. Dies erfolgt meist über Stepper- oder Piezo-Motoren. Die Echtzeitsteuerung verfügt über zwei Arten der Ansteuerung dieser Systeme. Besitzt der Antrieb eine eigene Kontrolleinheit, so kann diese über die weit verbreitete *RS-232*-Schnittstelle ferngesteuert werden. Außerdem können über zwei separate Hochspannungsverstärker beliebige Spannungsrampen zum direkten Antrieb eines Piezomotors ausgegeben werden. Wie in Abbildung 4.14A zu sehen ist, wird der aktuelle Annäherungsbefehl in der Variablen *Motor Command* auf dem Echtzeitrechner abgelegt. Bei Ankunft eines neuen Befehls wird dieser durch einen eigenen Prozess verarbeitet, an die Ausgabe via *RS-232*-Schnittstelle oder Hochspannungsverstärker weitergeleitet und anschließend aus der Variablen *Motor Command* entfernt.

Abbildung 4.14B zeigt ein Ablaufdiagramm der Grobannäherung. Vor Beginn der eigentlichen Annäherung kann eine Anzahl von Befehlen (*Precommands*) ausgeführt werden, um zum Beispiel eine Kontrollelektronik in einen bestimmten Betriebsmodus zu versetzen oder die Anschlussweise eines Piezo-Motors umzuschalten. Die eigentliche Annäherung erfolgt danach in zwei unterschiedlichen Betriebsarten. Im Modus *Z-Fixed* wird die Tunnelspitze bei aktivierter Höhenregelung und vollständig ausgefahrenem Z-Piezo an die Probe herangeführt. Bei Tunnelkontakt zieht die Höhenregelung die Spitze zurück und die Grobannäherung stoppt. Im Modus *Z-Scanning* wird die Tunnelspitze vollständig zurückgezogen, danach erst erfolgt ein Grobannäherungsschritt. Jetzt wird der Z-Piezo langsam in Richtung Probe bewegt. Erfolgt beim Vorfahren ein Tunnelkontakt war die Annäherung erfolgreich. Wird der Z-Piezo vollständig ausgefahren, ohne die Spitze in Tunnelkontakt zu bringen, erfolgt ein neuer Versuch mit Rückziehen der Z-Achse und nachfolgendem Grobannäherungsschritt. Nach erfolgreichem Herstellen des Tunnelkontaktes können wieder eine Anzahl von Befehlen (*Postcommands*) ausgeführt werden, um die Annäherungskontrolle gegebenenfalls in ihren Ausgangszustand zurückzusetzen. Die Betriebsart *Z-Scanning* verursacht beim Annähern erheblich weniger Beschädigungen an der Spitze als die Betriebsart *Z-Fixed*, ist jedoch nur für Annäherungsmechanismen verfügbar, die schrittweise von der Echtzeitsteuerung betrieben werden können.

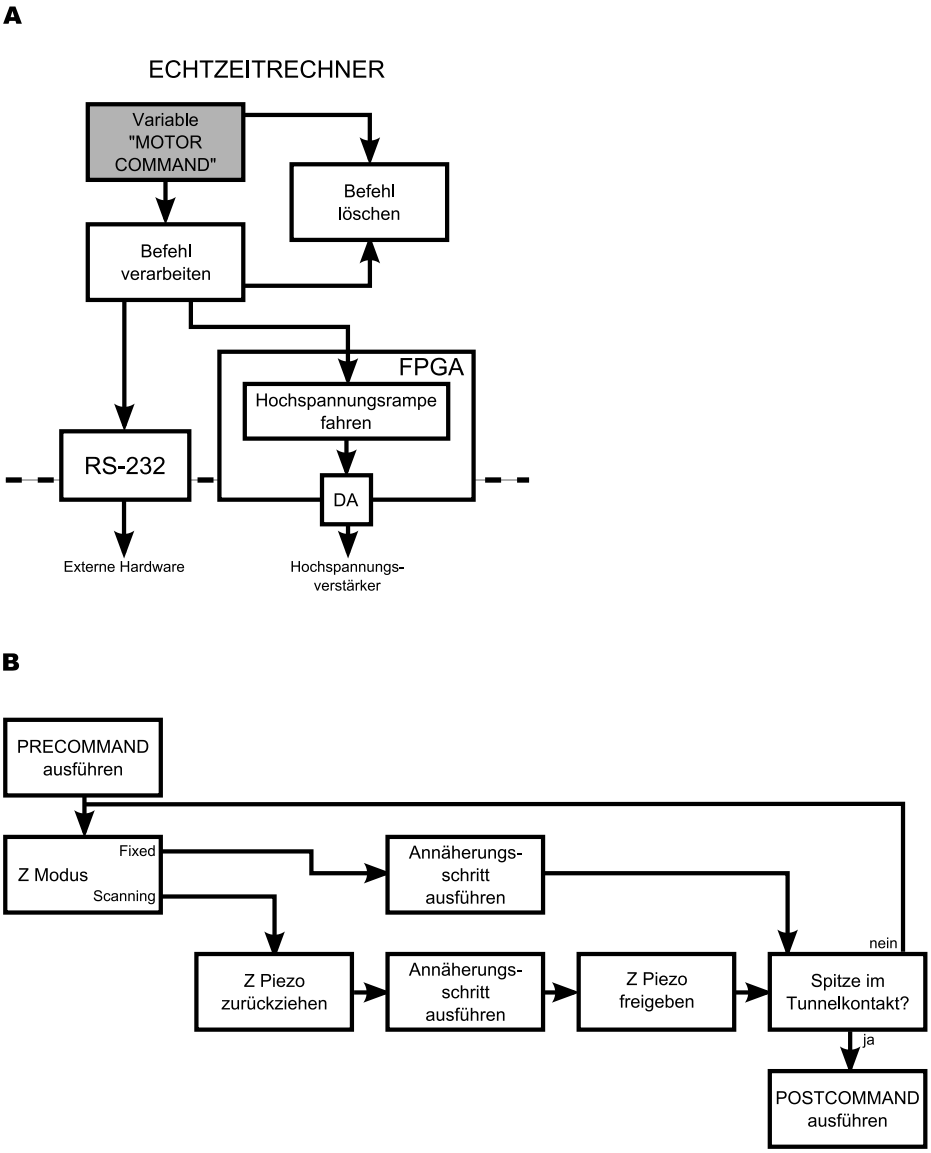


Abbildung 4.14: A) Verarbeitung der Annäherungsbefehle B) Ablauf der Grobannäherung

4.4.4 Erzeugung der statischen Ausgangsspannungen

Der Betrieb der Echtzeitsteuerung erfordert die Ausgabe einiger statischer Spannungen. Hierzu gehören die Tunnelspannung sowie die Spannungen zur Kontrolle von *Gain* und *Offset* der Hochspannungsverstärker. Zur Erzeugung dieser Spannungen werden eine Reihe von Ausgängen der analogen Ausgabemodule des Echtzeitrechners verwendet. Eine weitere Nachschaltung von Verstärkern ist in diesem Fall nicht nötig. Auf dem Echtzeitrechner wird ein Prozess ausgeführt, der die statischen Spannungen auf Anfrage des *Host-PC*'s ändert. Ohne Änderungsbefehl werden die Spannungen von den Ausgabemodulen autonom aufrechterhalten und stabilisiert. Die für die vorgesehenden Aufgaben erforderlichen Spannungswerte werden auf dem *Host-PC* berechnet.

4.5 Prozesse des *Host-PC*

Zentrales Element der Prozesse des *Host-PC*'s ist die Verarbeitung der Benutzereingabe (Abbildung 4.15). Diese Programmschleife hat Zugriff auf die Variablen *Host Variables*, *Image Memory*, *HV Data* und *Motor Data*. Die Variable *Host Variables* enthält alle Kontrolldaten des Programms. Hierzu gehören zum Beispiel die aktuellen Einstellungen des Tunnelmikroskops, aber auch die Positionen der Bildfenster und die zur Anzeige ausgewählten Bilddaten.

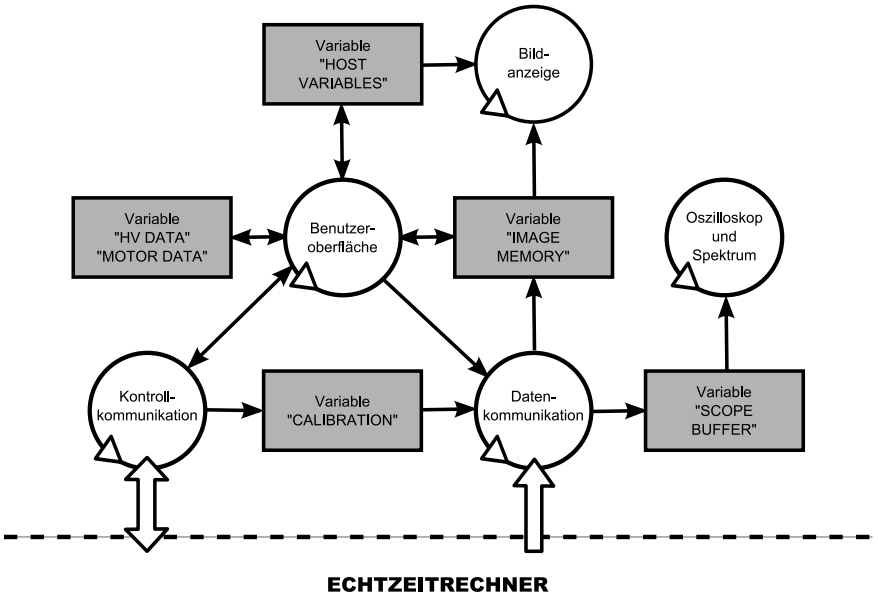


Abbildung 4.15: Datenstruktur des *Host-PCs*

In den Variablen *HV Data* und *Motor Data* sind die Ansteuerdaten der angeschlosse-

nen Hochspannungsverstärker und Grobannäherungsmechanismen gespeichert. Sie können bei Programmstart vom *Host-PC* oder Echtzeitrechner geladen werden. Im Speicherbereich *Image Memory* sind alle erfassten Messdaten abgelegt. Eine genaue Beschreibung der Speicheraufteilung ist in Abschnitt 4.5.2 zu finden. Messdaten werden bei angeschlossenem Echtzeitrechner kontinuierlich über den Prozess für die Datenkommuniktation empfangen, mit Hilfe der in der Variablen *Calibration* abgelegten Kalibrierungsinformationen auf reale physikalische Einheiten umgerechnet und über die Variable *Scope Buffer* im Diagnosebereich des *Host-PC* dargestellt. Bei aktivierter Bildabtastung werden die empfangenen Scanzeilen zusätzlich in den Bildspeicher der Variablen *Image Memory* gespeichert. Der Prozess zur Bildanzeige aktualisiert hierbei ständig die in der Variablen *Host Variables* zur Anzeige ausgewählten Datensätze. Wird durch Benutzereingabe eine Änderung des Betriebsmodus des Echtzeitrechners verlangt, so wird diese Änderung durch den Prozess der Kontrollkommunikation über Ethernet an den Echtzeitrechner weitergegeben. Gleichzeitig sorgt die Kontrollkommunikation dafür, dass bei einer Aktualisierung der Kalibrierungsinformationen der AD- und DA-Wandler diese Änderung in die Variable *Calibration* übernommen wird.

4.5.1 Erfassung der Bildaten

Die Datenkommunikationsschleife legt die empfangenen Datenpakete in einem *FIFO*-Buffer ab. Aus den Datenpaketen werden für die weitere Verarbeitung die Zeilen des Vorwärts- und Rückwärts-Scans mit zugehöriger Zeilennummer extrahiert. Der Vorwärts-Scan wird für die sofortige Anzeige in der Variable *Scope Buffer* abgelegt.

Die einzelnen Scanzeilen werden nun in die drei Kanäle Höhenwert, Tunnelstromwert und externer Signaleingang zerlegt. Die Messdaten der einzelnen Kanäle sind noch im 16Bit-*Integer*-Format des *FPGA* gespeichert und müssen über folgende Formeln in reale physikalische Einheiten umgerechnet werden.

$$z = [z_{\text{Binär}} \cdot FPGA_{Weight} - FPGA_{offset}] \cdot d_{x,y,z} \cdot HV_{Gain} \quad (4.6)$$

$$I = [I_{\text{Binär}} \cdot FPGA_{Weight} - FPGA_{offset}] \cdot d_I \cdot sgn(U_T) \quad (4.7)$$

$$Ext = [Ext_{\text{Binär}} \cdot FPGA_{Weight} - FPGA_{offset}] \cdot d_{Ext} \quad (4.8)$$

$z_{\text{Binär}}$, $I_{\text{Binär}}$ und $Ext_{\text{Binär}}$ bezeichnen die vom Echtzeitrechner kommenden Rohwerte. $FPGA_{Weight}$ und $FPGA_{offset}$ sind die Kalibrierungsinformationen des entsprechenden Eingangskanals des AD-Wandlers. $d_{x,y,z}$, d_I und d_{Ext} sind die Umrechnungsfaktoren von einem Spannungswert in reale physikalische Einheiten. Die Höhendaten müssen noch zusätzlich mit dem Verstärkungsfaktor HV_{Gain} der Hochspannungsverstärker gewichtet werden. In die Tunnelstromwerte wird gegebenenfalls noch das Vorzeichen der Tunnelspannung $sgn(U_T)$ eingerechnet, da bei den

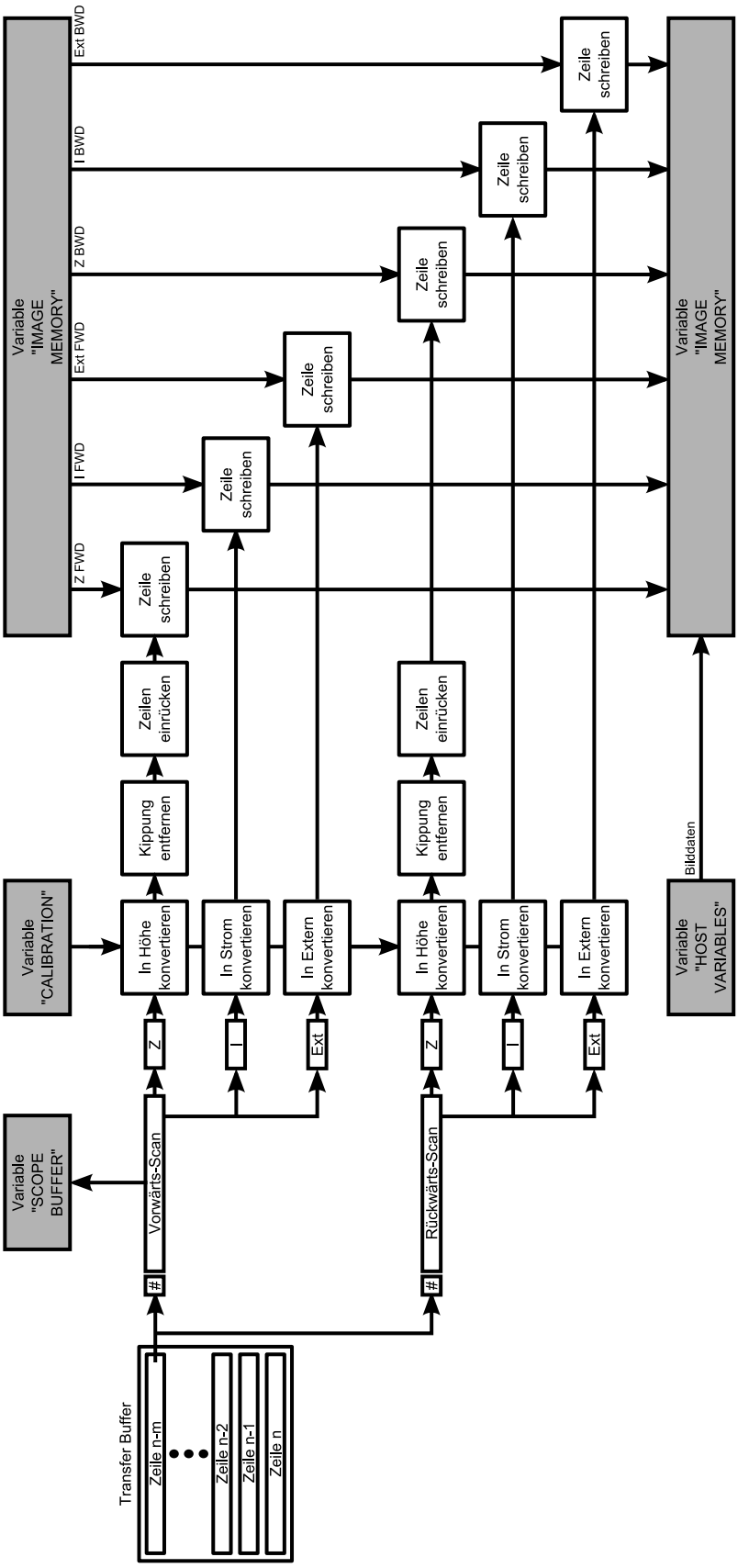


Abbildung 4.16: Empfangen der Bilddaten durch den *Host-PC*

meisten einfachen Vorverstärkern die Polarität des Ausgangssignals mit der Polarität der Tunnelspannung wechselt.

Danach durchlaufen die Höhendaten noch die Funktionen *Kippung entfernen* (siehe Abschnitt 4.5.1.1) und *Zeilen einrücken* (siehe Abschnitt 4.5.1.2). In der Variablen *Image Memory* werden nun die entsprechenden Zeilen des aktuellen Bildsatzes durch den neu empfangenen Zeilensatz ersetzt. Gleichzeitig werden aus der Variablen *Host Variables* die für den Datensatz relevanten Informationen zu dem aktuellen Bilddatensatz in der Variablen *Image Memory* abgelegt.

4.5.1.1 Kippung der Scanzeilen entfernen

Die durch den Piezo-Scanner vorgegebene Scan-Ebene und die Probenoberfläche stehen in den seltensten Fällen parallel zueinander. Deswegen ist das aufgenommene Bild meistens in eine Richtung verkippt. Für große Übersichtsbilder stellt das kein Problem dar, für hochauflösende Scans von atomaren Strukturen auf einer sonst glatten Probe erschwert diese Kippung die Bildauswertung erheblich.

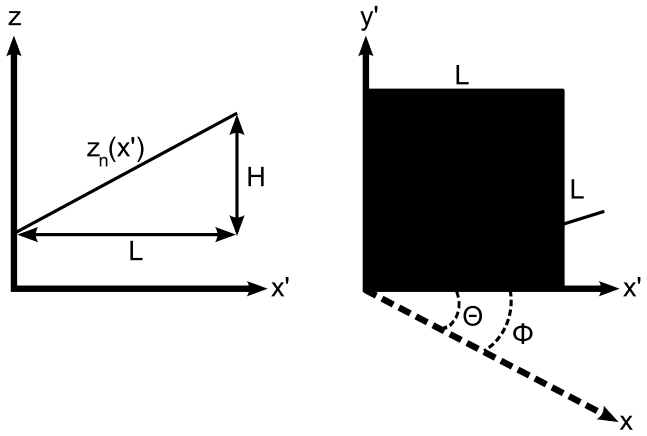


Abbildung 4.17: Kippung entfernen

Der durch die Kippung im angezeigten Bild verursachte Helligkeitsgradient überlagert die schwächeren durch die atomaren Strukturen verursachten Helligkeitsschwankungen. Abhilfe kann man durch eine Kippkompensation nach folgender Formel schaffen (siehe Abbildung 4.17).

$$z'_n(x') = z_n(x') - R\cos(\phi - \theta)x' \quad \text{mit} \quad R = \frac{H}{L} \tag{4.9}$$

Die normalisierte Scanzeile $z'_n(x')$ ergibt sich aus der Kippsteigung R als Verhältnis des Anstieges H zur Kantenlänge des Bildes L sowie dem Winkel ϕ zwischen der X-Achse des Weltkoordinatensystems und der Richtung des größten Flächenanstieges (Der Winkel θ gibt die Drehung des Bildkoordinatensystems gegenüber dem

Weltkoordinatensystem an). Die Parameter R und ϕ können von Anwender direkt eingegeben oder automatisch durch Auslesen von H und L bestimmt werden.

4.5.1.2 Einrücken der Scanzeilen

Durch äußere Einflüsse wie Schwingungen oder thermische Drift können die aufeinanderfolgenden Scan-Zeilen eines Bildes sich in ihrer absoluten Höhe gegeneinander verschieben (siehe Abbildung 4.18).

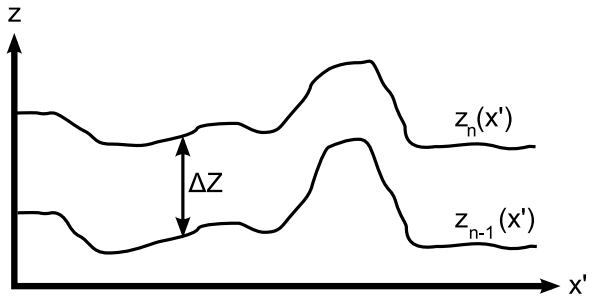


Abbildung 4.18: Scanzeilen einrücken

Diese Verschiebungen lassen das angezeigte Bild zerhackt erscheinen und machen eine spätere Auswertung oft unmöglich. Durch Bestimmung der Verschiebung z_{offset} der Zeile $z_n(x')$ zur vorherigen Zeile $z_{n-1}(x')$ und Umrechnung über folgende Formel lassen sich die beschriebenen Bildartefakte entfernen.

$$z'_n(x') = z_n(x') + z_{offset} \tag{4.10}$$

Die Berechnung von z_{offset} stellt jedoch ein gewisses Problem dar und verlangt unterschiedliche Algorithmen für unterschiedliche Probenstrukturen. Bei glatten Oberflächen funktioniert eine Verschiebung des Mittelwertes jeder Scan-Zeile auf den Z-Nullpunkt recht gut. z_{offset} ergibt sich dann als:

$$z_{offset} = -\frac{1}{L}\int_0^L z_n(x')dx' \tag{4.11}$$

Bei rauhen Probenoberflächen führt diese Vorgehensweise selber zu Artefakten. Zwischen Bereichen mit Erhebungen oder Senken und eher glatten Bereichen des Bildes kommt es zu einer ungewollten Verschiebung, da jeweils ihre Höhenmittelwerte angeglichen werden. Ein Lösungsweg für solche Daten eröffnet sich über die Betrachtung des Histogramms der Differenz $\Delta Z(x') = z_n(x') - z_{n-1}(x')$ der aktuellen und vorherigen Scan-Zeile.

$$z_{offset} = \Delta Z \in \Delta_{max} \quad \text{für} \quad h_{max} = \sup\{h_1, ..., h_m\} \tag{4.12}$$

$$\text{mit} \quad h_i = \int_0^L Q_i\left(\Delta Z(x')\right) dx' \quad \text{und} \quad Q_i(\Delta Z) = \left\{\frac{1: \ \Delta Z \in \Delta_i}{0: \ \Delta Z \notin \Delta_i}\right\} \tag{4.13}$$

Hierzu wird der Bildbereich von $\Delta Z(x')$ in m äquidistante Bereiche Δ_i aufgeteilt und die Anzahl h_i der Werte von ΔZ in jedem dieser Bereiche Δ_i gezählt. Das zu dem Δ_i mit dem höchsten h_i Wert gehörige ΔZ wird als z_{offset} verwendet.

4.5.2 Anzeige und Verarbeitung der Bilddaten

Die Software stellt des Weiteren eine Vielzahl von Verarbeitungs- und Darstellungsmöglichkeiten der erfassten Messdaten zur Verfügung. Abbildung 4.19 zeigt die interne Struktur der Variablen *Image Memory* und die Möglichkeiten der Datenmanipulation innerhalb dieses Bildspeichers. An erster Stelle stehen vier 8-Bit Bildspeicher, die jeweils den vier Anzeigefenstern zugeordnet sind. Danach kommt ein Speicherbereich für sechs Bilder aus 64-Bit Gleitkommazahlen des aktuellen Scans und dem dazugehörigen Satz von Bildinformationen. Hier entfallen jeweils drei Bilder auf den Vorwärts- und drei Bilder auf den Rückwärts-Scan mit den Kanälen Z, I und *Extern*. Drei äquivalente Speicherbereiche beherbergen die Daten der drei Memory-Datensätze. Den Abschluss bilden N Speicherbereiche gleichen Typs für die Aufnahme von Bildsequenzen mit N Bildern (*Sequenzer*).

Die Datenkommunikation schreibt bei aktivierter Probenabtastung kontinuierlich Scan-Zeilen in den aktuellen Bilddatensatz. Diese werden zur Erfassung von Bildsequenzen automatisch nach Abschluss des Bildes in den Speicherbereich des Sequenzers kopiert. Die drei Memory-Datensätze dienen dem Benutzer zur Analyse und Bearbeitung seiner Messdaten. Bilddaten können hierher aus dem aktuellen Datensatz, dem Sequenzer oder von der Harddisk kopiert werden. Die Bearbeitungsfunktionen umfassen unter anderem Subtraktion von Bildern, Invertieren von Bildern, verschiedene Rauschfilter, Vermessung von Schnittprofilen und Durchführung einer Fourieranalyse mit umfangreichen Filterfunktionen. Außerdem können die Bilddaten verlustfrei in einem eigenen Datenformat gespeichert oder als *BMP*- oder *JPG*-Bilddatei exportiert werden.

Für die Bildanzeige ausgewählt werden können alle Bilder aus allen Speicherbereichen. Das entsprechende Bild wird hierzu ins 8-Bit Format konvertiert, auf die Größe des gewählten Anzeigefensters skaliert und in den dazugehörigen 8-Bit Bildspeicher kopiert. Hier wird es noch mit dem *On-Screen-Display* (*OSD*) überlagert, das Informationen über die aktuellen Scan-Parameter und die Bildlage in Bezug auf vorher aufgenommene Datensätze gibt. Für die Anzeigefenster können separat Helligkeits-, Kontrast- und Gammawert gewählt werden.

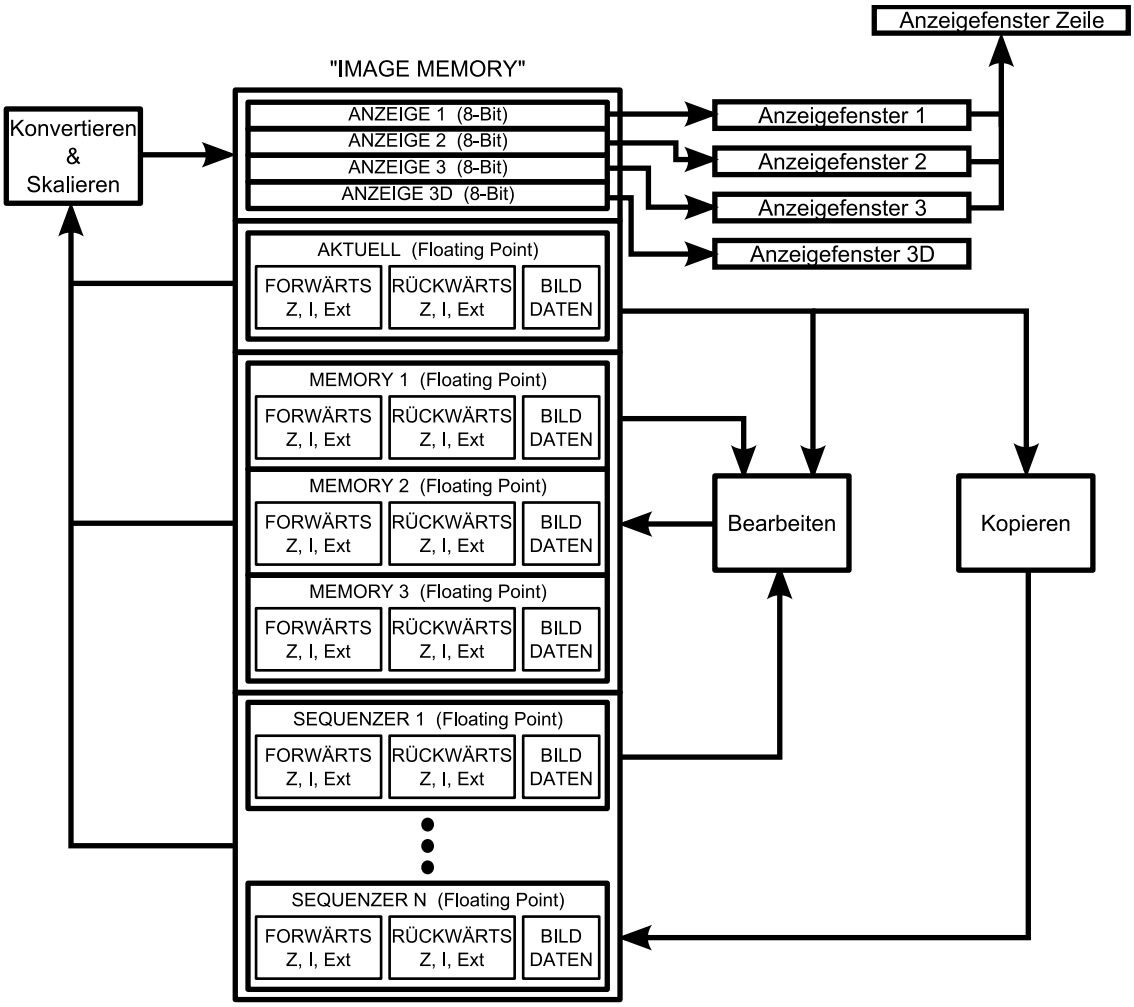


Abbildung 4.19: Anzeige und Verarbeitung der Bilddaten

4.6 Netzwerkkommunikation zwischen *Host-PC* und Echtzeitrechner

Host-PC und Echtzeitrechner sind über ein *Ethernet* [6] miteinander verbunden und durch eine feste *IP*-Adresse eindeutig identifiziert. Kommunikation zwischen den beiden Plattformen erfolgt ausschließlich über das *TCP*-Protokoll [7]. Der Echtzeitrechner stellt seine Messdaten im *Ethernet* als Netzwerk-Server bereit, die von dem *Host-PC* als Netzwerk-Client abgeholt werden können. Daten- und Kontrollkommunikation erfolgt hierbei über verschiedene Netzwerk-Ports [8].

4.6.1 Transfer der Kontrolldaten

Der Transfer der Kontrolldaten umfasst alle Daten, die keine zu einem Bild gehörigen Messdaten sind (Abbildung 4.20).

Die Kontrollkommunikation beginnt damit, dass der Echtzeitrechner auf *Port 5011* (*Listen*) auf eine ankommende Verbindung der *Host-PC*'s (*Open*) wartet. Nach erfolgter Verbindung wird von dem *Host-PC* das Zeichen 0 an den Echtzeitrechner geschickt um den Transfer der Kontrolldaten einzuleiten. Als Nächstes empfängt der *Host-PC* vom Echtzeitrechner die Kalibrierungsinformationen der AD- und DA-Wandler. Die Kommunikation über das *TCP*-Protokoll erfolgt im *ASCII*-Datenformat [9]. Daher werden alle Daten vor dem Versenden in dieses Format konvertiert und nach der Übertragung wieder zurückgewandelt. Danach werden aus den Einstellungen der Kontrollvariablen *Host Variables* des *Host-PC* der neue Betriebsmodus des Echtzeitsystems generiert und an den Echtzeitrechner geschickt. Danach wird die aufgebaute Verbindung wieder unterbrochen und der Echtzeitrechner wartet auf die nächste ankommende Übertragung.

4.6.2 Transfer der Voreinstellungen

Um mit einem *Host-PC* auf verschiedene Echtzeitrechner zugreifen zu können, an denen verschiedene Tunnelmikroskope angeschlossen sind, ist es vorgesehen, beim

[6] *Ethernet* ist ein nach der *IEEE*-Norm 802.3 spezifizierter Standard für kabelgebundene Datennetze. Seit 1990 stellt *Ethernet* die weltweit verbreiteste Form eines Datennetzes dar.

[7] Das *Transmission-Control-Protocol* (*TCP*) wurde von R. E. Kahn und V. G. Cerf im Jahr 1973 entwickelt. Seit 1981 ist es als *RFC-793* standardisiert und findet z.B. als Transportmedium für das *World-Wide-Web* (*WWW*) und *Electronic-Mail* (*E-Mail*) weite Verbreitung.

[8] Ein Netzwerk-Port ist eine Subadresse eines am Netzwerk angeschlossenen und über die *IP*-Adresse identifizierten Computers. Er dient dazu die Netzwerkkommunikation verschiedener auf dem Computer ausgeführter Programme auseinanderzuhalten.

[9] Der *American-Standard-Code-for-Information-Interchange* (*ASCII*) ist eine 7-Bit Zeichenkodierung nach dem *ISO-646*-Standard.

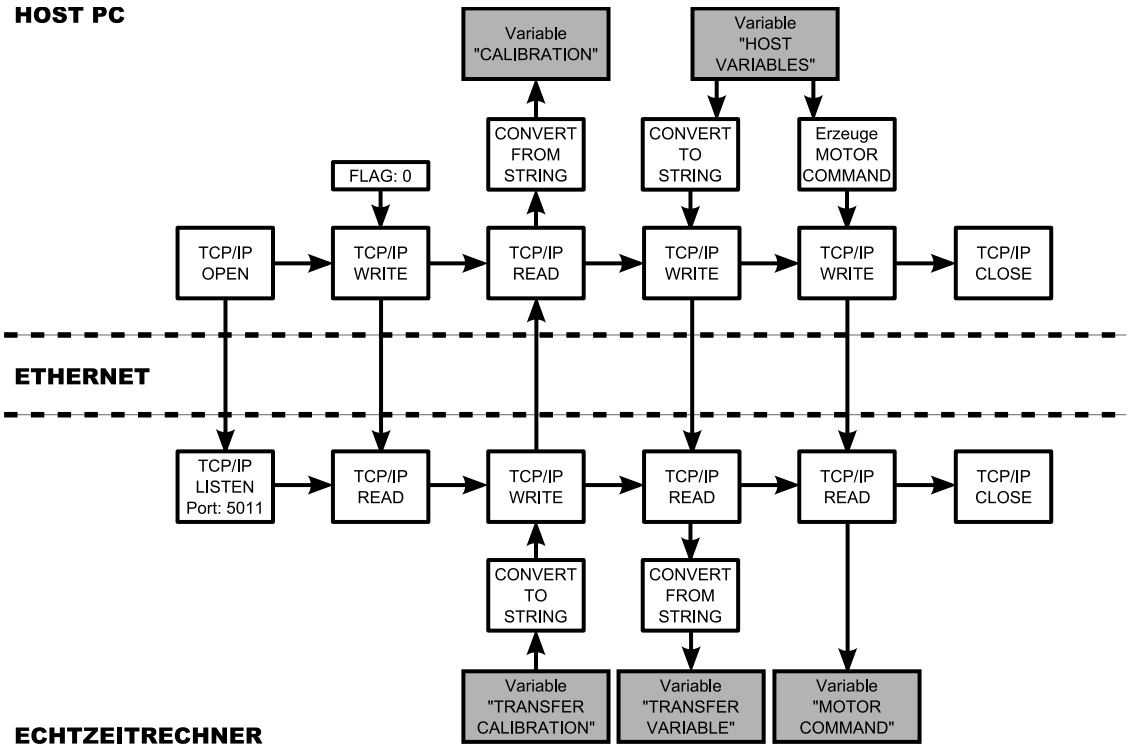


Abbildung 4.20: Netzwerktransfer der Kontrolldaten

Wechseln zwischen den Mikroskopen den aktuellen Betriebsmodus auf den zugehörigen Echtzeitrechnern ablegen zu können. So kann es zu keiner Vermischung der Voreinstellungen verschiedener Systeme kommen.

Der Transfer der Voreinstellungen erfolgt im Prinzip wie der Transfer der Kontrolldaten wieder über *Port 5011*. Als Startzeichen wird nur zum Speichern der Voreinstellungen eine 1 gesendet (Abbildung 4.21). Danach werden die Variablen *HV Data*, *Motor Data* und *Host Variables* über *Ethernet* zum Echtzeitrechner gesendet und dort auf die Harddisk gespeichert. Diese Variablen enthalten alle Informationen über den Betriebszustand der Echtzeitsteuerung.

Zum Laden der Voreinstellungen wird als Startzeichen eine 2 gesendet (Abbildung 4.22). Die vorher dort abgelegten Variablen werden von der Harddisk des Echtzeitrechners geladen und an den *Host-PC* übergeben. Dort stellt sich nun der gesicherte Betriebszustand ein.

4.6.3 Transfer der Bilddaten

Im Gegensatz zu der Kontrollkommunikation wird für die Datenkommunikation eine ständige Verbindung zwischen Echtzeitrechner und *Host-PC* auf *Port 5010* offen gehalten (Abbildung 4.23). Die auf dem Echtzeitrechner erzeugten Messdaten

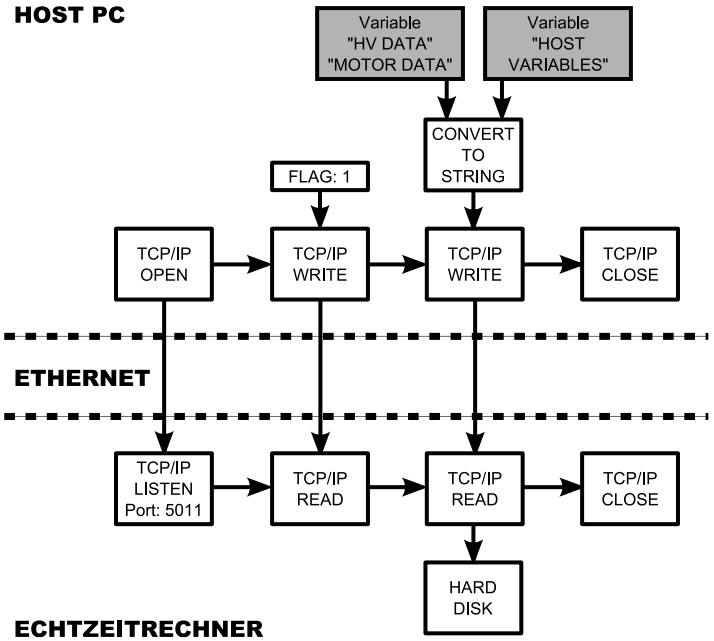


Abbildung 4.21: Speichern der Voreinstellungen über das Netzwerk

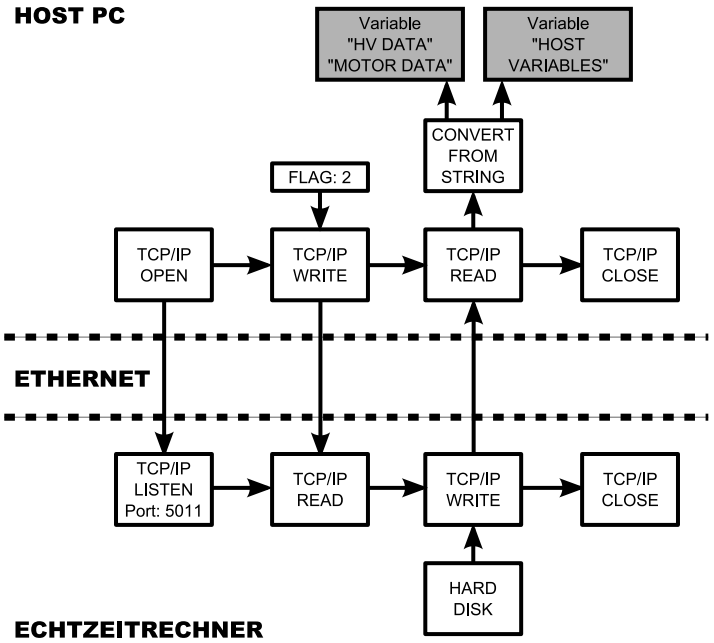


Abbildung 4.22: Laden der Voreinstellungen über das Netzwerk

werden aus dem *FIFO*-Buffer ausgelesen und über *Ethernet* an den *Host-PC* weitergegeben. Dort werden sie zur weiteren Verarbeitung in einem zweiten *FIFO*-Buffer zwischengespeichert. Bei einer kurzen Unterbrechung der Kommunikation zwischen Echtzeitrechner und *Host-PC* fangen die beiden *FIFO*-Buffer den entstehenden Datenstau auf. Bei einer längeren Unterbrechung und dem daraus folgenden Überlauf des Buffers auf dem Echtzeitrechner wird die Messdatenerfassung solange eingestellt bis eine erneute Netzwerkverbindung zustande kommt.

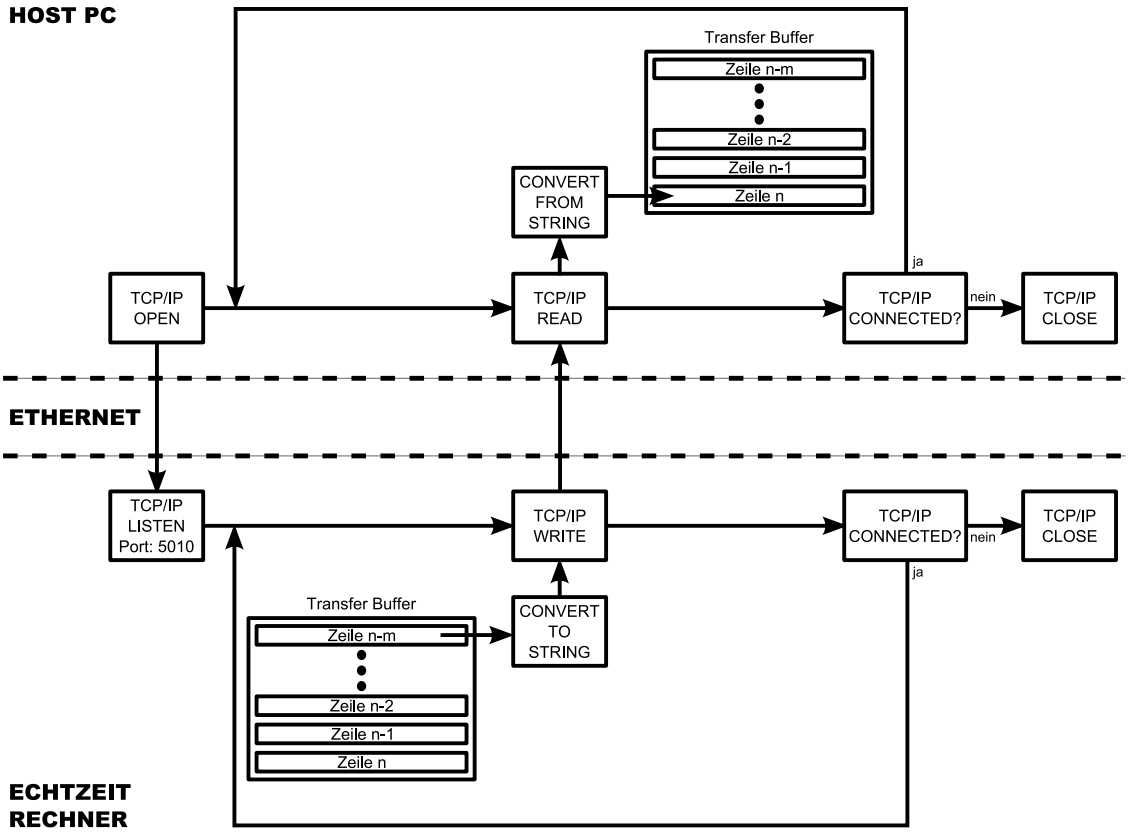


Abbildung 4.23: Netzwerktransfer der Bilddaten

Die Dauer einer Messung liegt für die Echtzeitsteuerung bei ungefähr drei Sekunden Messzeit pro Megabyte Datenvolumen (Abbildung 4.24). Dabei entfällt ungefähr $\frac{1}{3}$ der Messzeit auf die Netzwerkübertragung und $\frac{2}{3}$ auf die Messdatenerfassung. Dies ergibt eine Übertragungsgeschwindigkeit von ca. $0,3\frac{MByte}{s}$. Das ist die Hälfte der mit drei Datenkanälen mit jeweils 16-Bit Tiefe und einer maximalen Abtastrate von $100kHz$ ohne Verarbeitung möglichen Datenrate von $0,6\frac{MByte}{s}$. Für einen Bilddatensatz mit einer Größe von 128 x 128 Pixeln bedeutet dies eine Messgeschwindigkeit von ca. einem Bild pro Sekunde. Ohne Betrachtung der Datenübertragung erreicht die Echtzeitsteuerung sogar eine Datenrate von $0,5\frac{MByte}{s}$.

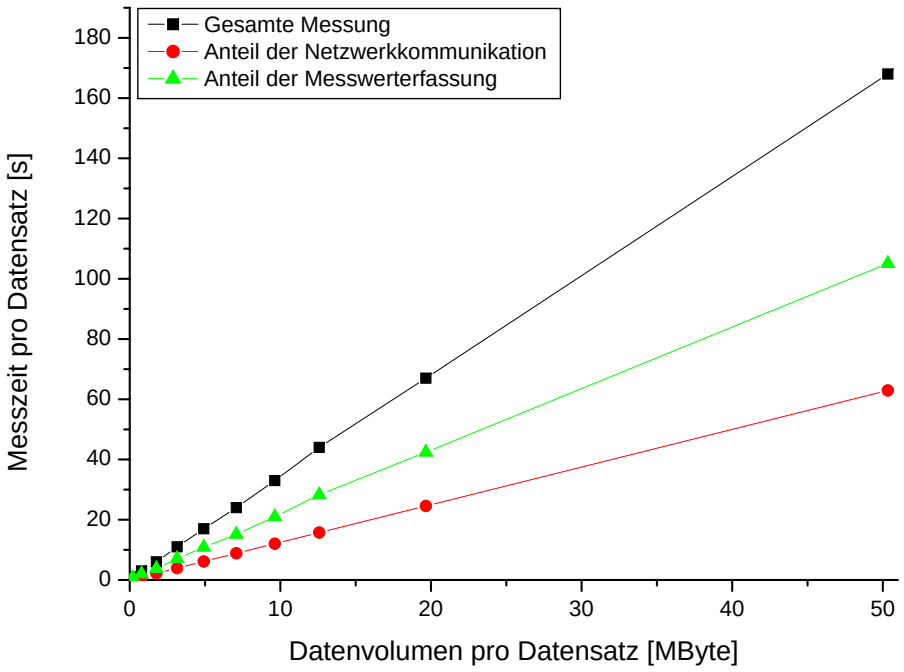


Abbildung 4.24: Messgeschwindigkeit in Abhängigkeit von der Bildgröße

4.7 Schlussfolgerung

Durch Verlagerung der meisten Steuerungsaufgaben in die Software bleibt die Echtzeitsteuerung auch nach Abschluss der Hardware-Entwicklung flexibel und kann an verschiedene Aufgabenbereiche indivduell angepasst werden. Aufgrund der Aufteilung der Software auf die drei Ausführungsebenen *Host-PC*, *Echtzeitrechner* und *FPGA* kann zu jedem Zeitpunkt ein deterministischer Ablauf der Regelkreise garantiert werden. Schließlich ermöglicht die Client-Server-Architektur auf *Ethernet*-Basis den Zugriff unterschiedlicher Anwender von verschiedenen Orten auf ein Instrument. Auch können auf diesem Weg Ferndiagnose und Fernwartung durchgeführt werden.

Kapitel 5

Anwendungen der Echtzeitsteuerung

Dieses Kapitel schildert Projekte, in deren Rahmen die Echtzeitsteuerung eingesetzt wird. Anhand von konkreten Beispielen wird der in Kapitel 2 aufgestellte Anforderungskatalog auf seine Machbarkeit überprüft.

5.1 *SONOS* Projekt

Seit Juli 2001 plant die *European Space Agency* (*ESA*) den Einsatz eines Tunnelmikroskops an Bord der internationalen Raumstation *ISS*. Im März 2002 gab das *European Space Research and Technology Centre* (*ESTEC*) der *ESA* eine Machbarkeitsstudie [1] mit Namen *Scanning Probe Microscope for Bio- and Nanotechnology onboard the International Space Station ISS* (*SONOS*) bei der Abteilung für Weltraumforschung der *Kayser-Threde GmbH* [2] in Auftrag. Die eigentliche Instrumentenentwicklung wurde dann von *Kayser-Threde* an das *Excellence Network Nano-Bio-Technology* (*ENNaB*) der *Ludwig-Maximilians-Universität* (*LMU*) in München abgetreten. Bis November 2003 wurde eine erste Version des *SONOS* Mikroskopes fertiggestellt und erfolgreich mit einer kommerziellen Steuerelektronik getestet. Die Weltraumtauglichkeit des mechanischen Aufbaus wurde im Folgenden bei mehreren Parabelflügeln demonstriert (siehe [Dro2004]). Im Oktober 2003 fand eine erste Konferenz zur Planung konkreter Projekte für ein Tunnelmikroskop an Bord der *ISS* statt (siehe [Ktb2003]).

Im Mai 2006 begann die Entwicklung und Anpassung der in den vorherigen Kapiteln vorgestellten Echtzeitsteuerung an der *Gottfried Wilhelm Leibniz Universität*

[1] *ESA*-Kontraktnummer *15784/02/NL/PA*

[2] www.kayser-threde.com

(*LUH*) in Hannover. Im November 2006 erfolgte die Abschlusspräsentation des *SONOS* Projektes auf dem Gelände der *ESTEC* in Noordwijk unter Verwendung dieses Steuersystems.

5.1.1 Aufbau des *SONOS* Mikroskops

Das *SONOS* Mikroskop arbeitet bei Atmosphärendruck und Raumtemperatur. Abbildung 5.1 zeigt die letzte Version des Instruments. Es besteht aus einem elektrisch und mechanisch abgeschirmten Gehäuse, in dem eine Plattform mit dem eigentlichen Tunnelmikroskop untergebracht ist. In einer Mikrogravitationsumgebung wie der *ISS* schwebt diese Plattform frei im Gehäuse und wird nur durch einen Satz Elastomerbänder gegen Anstoßen an die Gehäusewände gesichert. So wird das Einkoppeln mechanischer Schwingungen auf dem Messkopf minimiert. Mit Hilfe eines mechanischen Fangsystems kann die Mikroskopplattform aus ihrem Schwebezustand eingefangen und fixiert werden. Diese Sicherung erfolgt während eines Probenwechsels oder der Wartung des Instruments. Für Tests bei normaler Gravitation ist die Plattform zusätzlich an Federn im Gehäuse aufgehängt. Die Elastomerbänder können jetzt als zusätzliche Dämpfung eingesetzt werden.

Auf Abbildung 5.2 ist schematisch der Aufbau des eigentlichen Tunnelmikroskops auf der Trägerplattform zu sehen. Das Mikroskop basiert auf dem *Advanced Pocket-size STM*(*AP-STM*) der *AG Heckl*, einem Derivat des erstem kommerziellen Tunnelmikroskops der Firma *IBM* (siehe [Ger1986]). Ein Steppermotor (1) bewegt eine Mikrometerschraube (2), die die Trägerplatte des Probenhalters (4) über ein Gegenlager (3) verkippt. Der so entstandene einseitige Hebel übersetzt die Bewegung der Mikrometerschraube im Verhältnis 4 : 1 in eine Bewegung von Probenhalter zu Tunnelspitze (5). Diese Bewegung dient zur Grobannäherung von Tunnelspitze und Probe. Die Probe ist auf eine Metallplatte aufgesetzt und wird damit auf dem magnetischen Probenhalter befestigt.

Die Tunnelspitze ist mit einer Klemmschraube auf einem handelsüblichen Piezoscanner in Röhrenform befestigt. Bei einer maximalen Ansteuerspannung von $\pm 100V$ hat dieser in X- und Y-Richtung eine maximale Auslenkung von $2\mu m$ und in Z-Richtung eine maximale Auslenkung von $800nm$. Der Tunnelstrom wird über einen *JFET*-Operationsverstärker in Strom-Spannungswandler-Schaltung um einen Faktor 10^8 verstärkt. Die gesamte Einheit aus Tunnelspitze, Probe, Probenhalter und Vorverstärker kann mit einem magnetisch gehalterten Metalldeckel verschlossen werde. Dies trägt noch einmal zur Abschirmung gegen elektrische Einstreuungen bei. Eine detailliertere Beschreibung des Instruments ist in [Kta2003] zu finden.

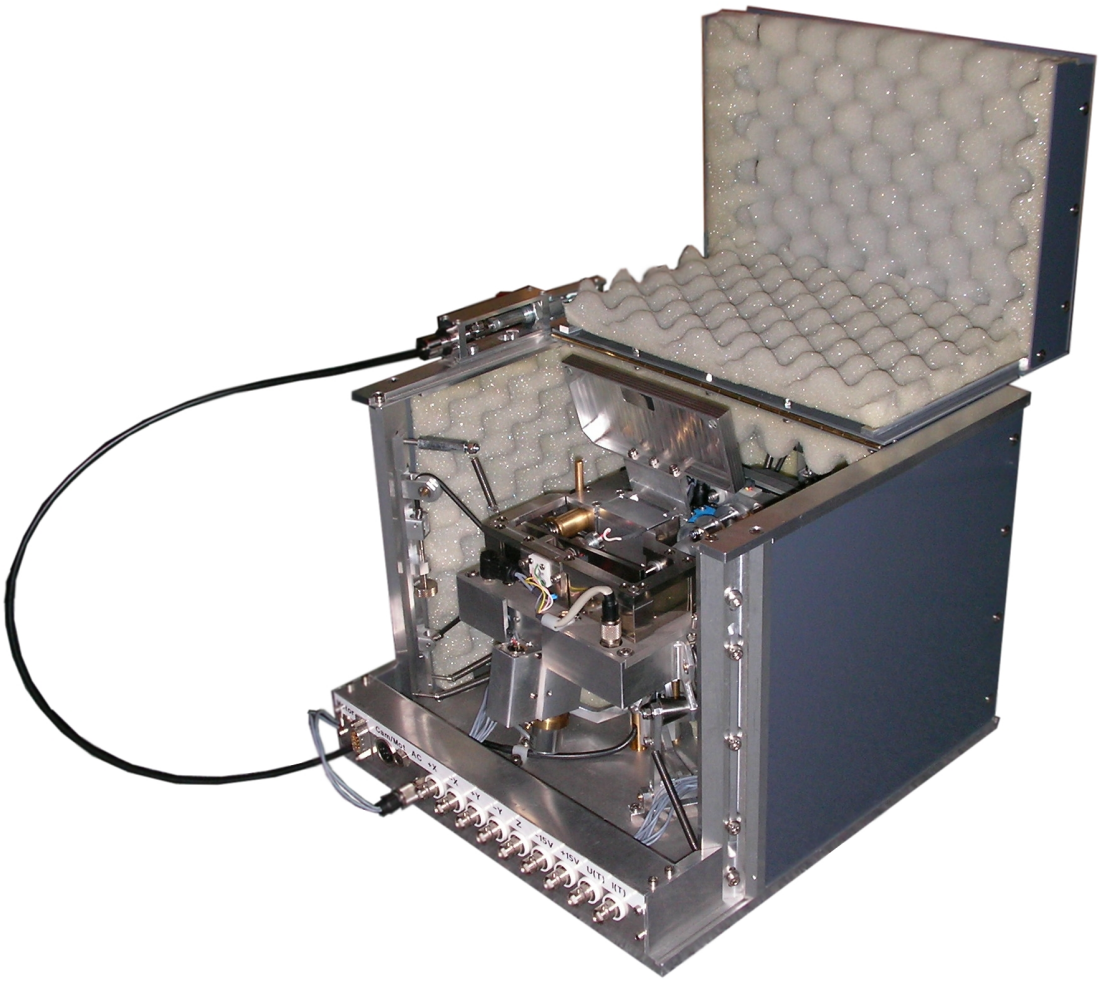


Abbildung 5.1: Ansicht des *SONOS* Tunnelmikroksops

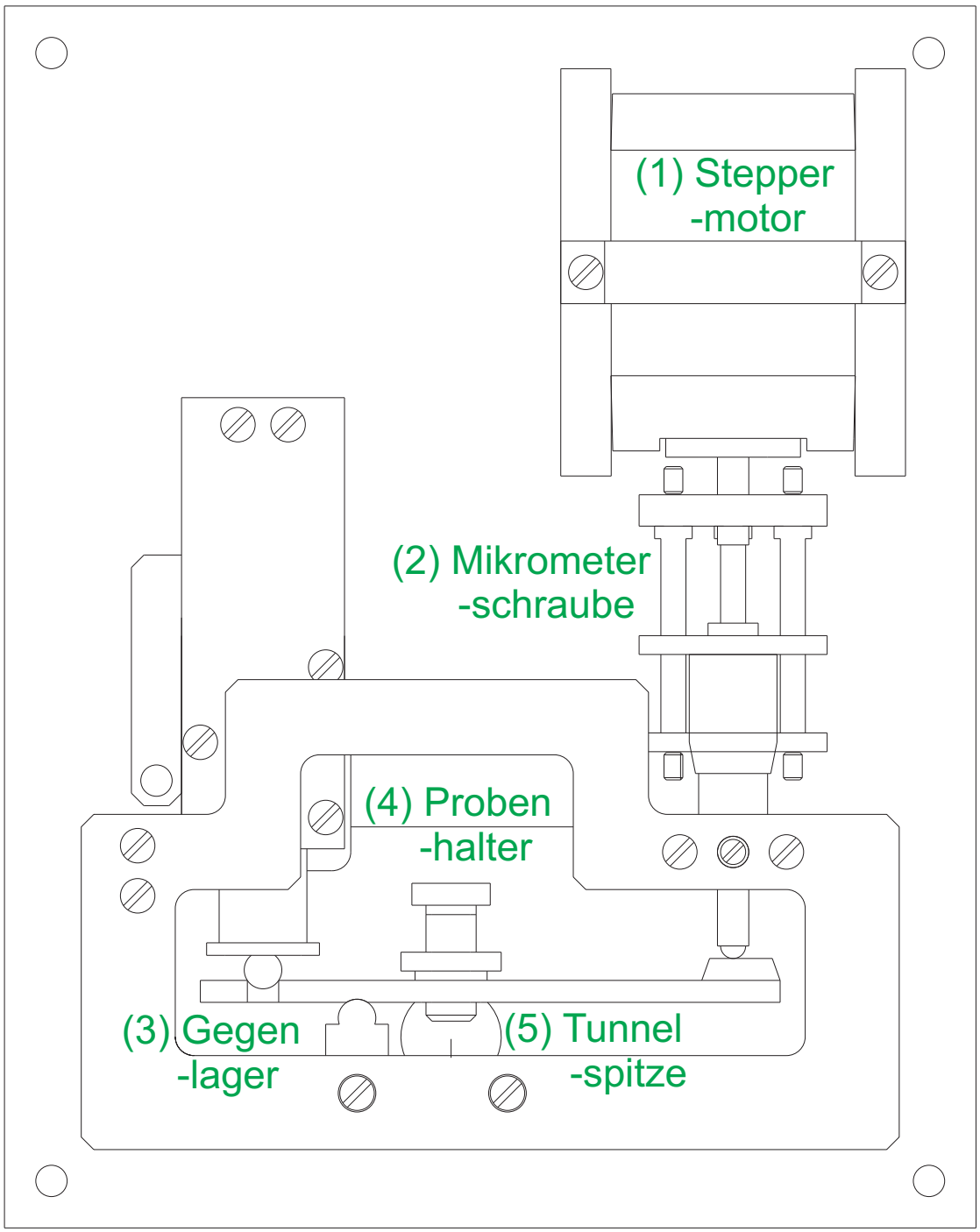


Abbildung 5.2: Schematischer Aufbau des *SONOS* Mikroskopes nach [Kta2003]

5.1.2 Testmessungen mit dem *SONOS* Mikroskop

Testmessungen werden an einem Goldfilm auf einem Siliziumsubstrat und Graphit (*HOPG*) vorgenommen. Alle Messungen erfolgen bei Raumtemperatur und Atmosphärendruck. Die Probe tastet eine gerissene Platin-Iridium-Spitze ab. Hierbei werden neben der standardmäßig im Instrument vorhandenen Schwingungsdämpfung keine weiteren Dämpfungssysteme benutzt. Die Höhenregelung des Tunnelmikroskops wird für die Messungen im *Constant-Current*-Modus betrieben.

5.1.2.1 Goldterrassen

Als erstes Testpräparat dient eine Goldschicht auf einem Silizumwafer. Der Goldfilm wird durch einen Metallverdampfer mit Direktstromheizung unter Hochvakuumbedingungen ($p < 5 \cdot 10^{-6} mbar$) auf den vorher gereinigten Wafer aufgebracht. Während des Beschichtens wird das Silizumsubstrat auf Raumtemperatur gehalten. Abbildung 5.3 zeigt die so gefertigte Goldoberfläche. Die Höhendaten wurden bei einem Tunnelstrom $I_T = 100pA$ und einer Tunnelspannung $U_T = 50mV$ innerhalb von $t = 105s$ aufgenommen. Innerhalb des $500nm$ x $500nm$ umfassenden Scanbereichs sind die typischen, durch Stufenkannten getrennten Goldterrassen zu erkennen.

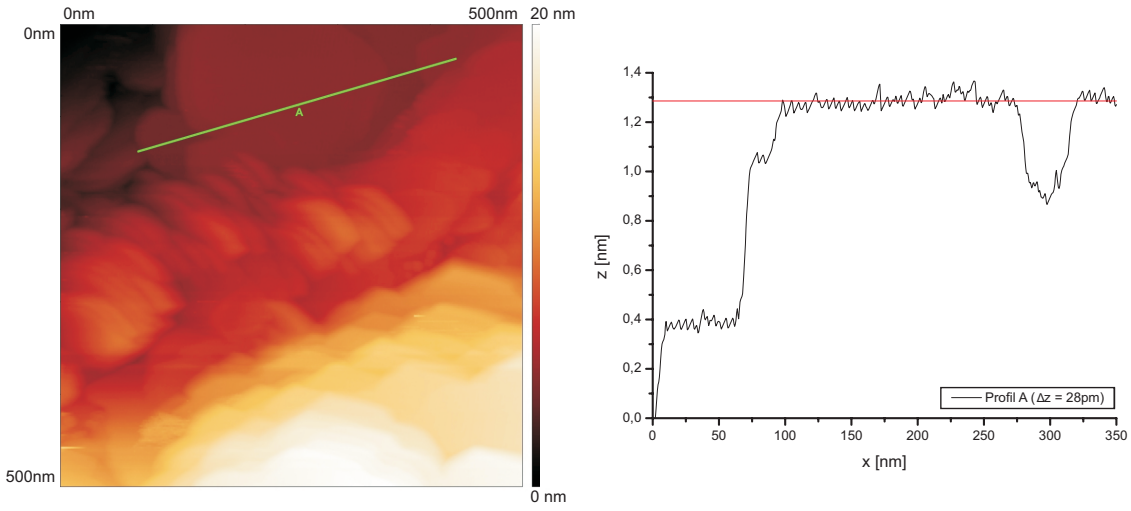


Abbildung 5.3: Goldterrassen, $I_T = 100pA$, $U_T = 50mV$, $t = 105s$

Die einzelnen Terrassen besitzen eine nahezu atomar glatte Oberfläche. In Abbildung 5.3 ist ein Höhenprofil über eine der größeren Goldterrassen zu sehen. Das mittlere Höhenrauschen auf der Terrasse beträgt $28pm$. Bei der vorgegebenen Piezokonstante $d_z = 4\frac{nm}{V}$ in Z-Richtung entspricht dies einem mittleren elektronischen Rauschen von $7mV$. Dies ist um einen Faktor 10 höher als das mittlere elektronische Rauschen der Kontrolleinheit (siehe Abschnitt 3.4). Damit wird die Auflösung des

Mikroskops durch Schwingungen des mechanischen Aufbaus und nicht durch das elektronische Rauschen der Kontrollelektronik begrenzt.

5.1.2.2 *HOPG*

Zweites Testpräparat ist hochorientierter pyrolytischer Graphit (*HOPG*). Die Oberflächenatome des Graphits bilden eine hexagonale Wabenstruktur (Abbildung 5.4). Als Erhebungen sichtbar im Tunnelmikroskopbild sind nur solche Oberflächenatome, unter denen sich genau ein Atom der darunterliegenden Kristallebene befindet (Atom A in Abbildung 5.4). Oberflächenatome, die kein Atom der zweiten Ebene unter sich haben, werden als Senken abgebildet (Atom B in Abbildung 5.4). Die sichtbaren Atome haben untereinander einen Abstand von $246pm$.

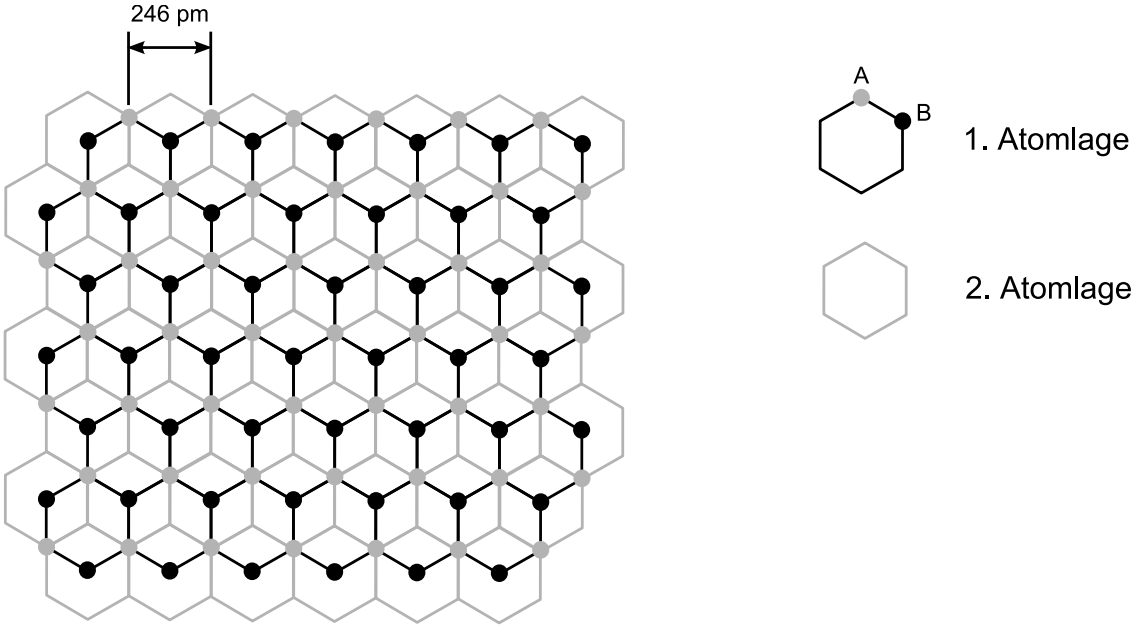


Abbildung 5.4: Aufbau der *HOPG*-Oberfläche

Abbildung 5.5 zeigt zwei Messungen auf der *HOPG*-Oberfläche. Die hexagonale Oberflächenstruktur ist gut zu erkennen. Im linken Bildausschnitt kann in der Bildmitte ein Oberflächendefekt ausgemacht werden. Anhand der Messdaten soll auch hier das Rauschen in X-, Y- und Z-Richtung ermittelt werden.

Höhenprofile über die vermessene Oberfläche sind in Abbildung 5.6 zu sehen. Die Messabweichungen des Abstandes zweier Nachbaratome und die Abweichung von der mittleren Spitzenhöhe der Atome werden ausgewertet. Das mittlere Höhenrauschen beträgt $\Delta z = 11pm$ und das Rauschen in X- bzw. Y-Richtung ergibt sich zu $\Delta d = 25pm$. Bei der vorgegebenen Piezokonstante $d_z = 4\frac{nm}{V}$ in Z-Richtung und $d_{x,y} = 13\frac{nm}{V}$ in X- bzw. Y-Richtung entspricht dies einem mittleren elektronischen Rauschen von $3mV$ bzw. $2mV$. Dies ist um einen Faktor 5 höher als das mittlere

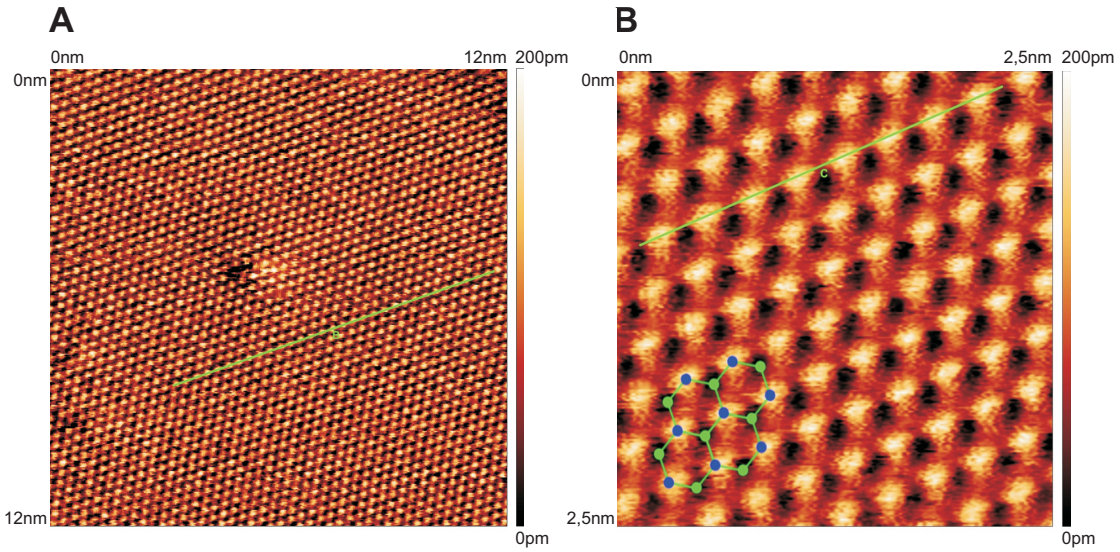


Abbildung 5.5: Oberfläche von *HOPG*
A: $I_T = 1nA$, $U_T = 100mV$, $t = 20s$ B: $I_T = 1nA$, $U_T = 100mV$, $t = 7s$

elektronische Rauschen der Kontrolleinheit (siehe Abschnitt 3.4). Also wird auch im Bereich atomarer Strukturen die Auflösung des Mikroskops durch Schwingungen des mechanischen Aufbaus und nicht durch elektronisches Rauschen der Kontrollelektronik begrenzt.

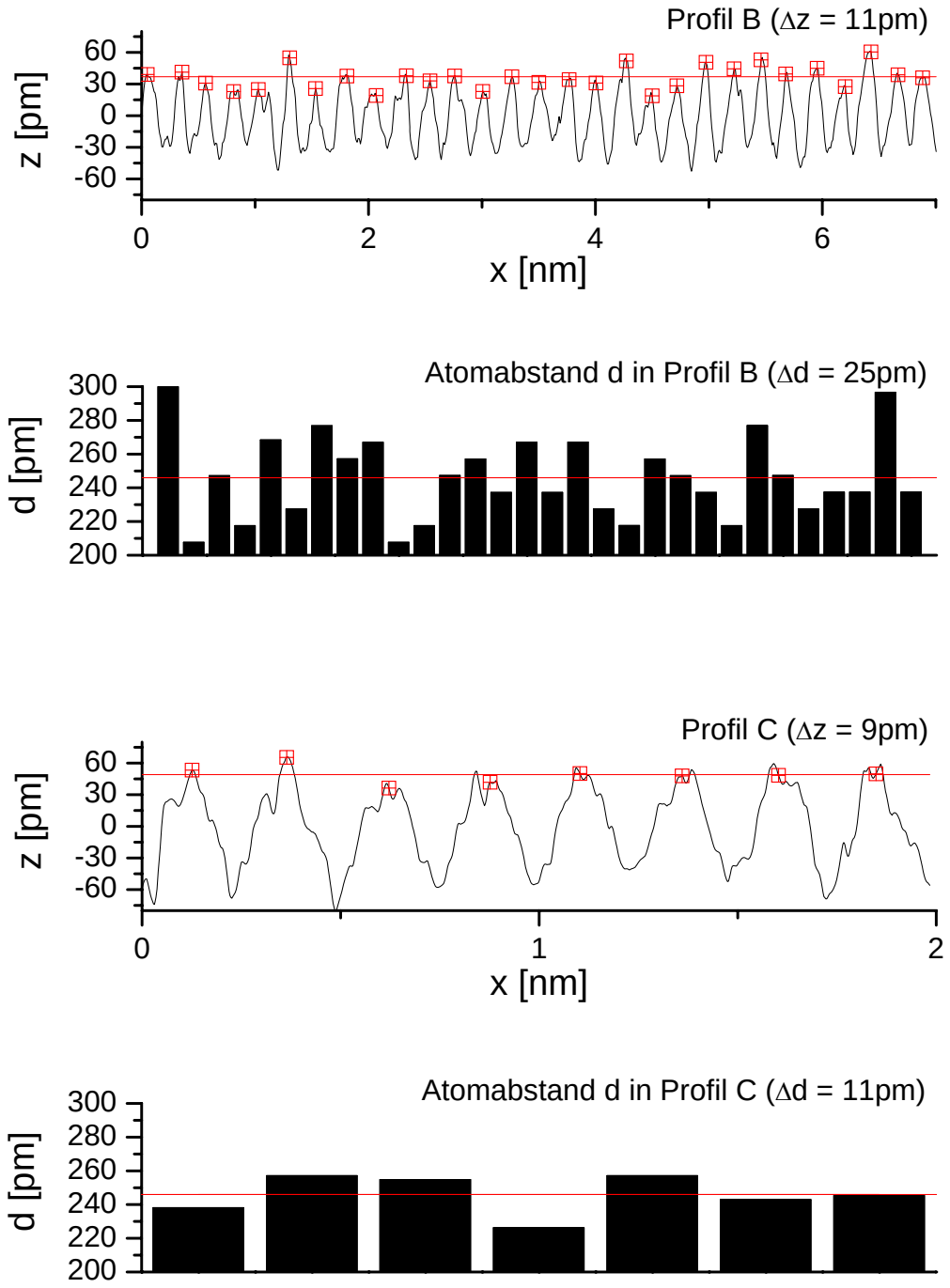


Abbildung 5.6: Höhenprofile aus Abbildung 5.5

5.2 Multiskalen-*STM*

Das Multiskalen-Tunnelmikroskop befindet sich noch in der Entwicklungsphase. Fertig gestellt soll es in der Lage sein einen Bildbereich von einem halben Millimeter Bildgröße bis hinunter zur atomaren Auflösung abzubilden. Dazu wird ein zweistufiges System zur Positionierung der Messspitze auf der Probe eingesetzt. Zur Feinpositionierung ist die Tunnelspitze an einem Röhrenpiezoscanner oberhalb der Probenoberfläche angebracht. Die Grobpositionierung übernimmt ein durch Piezomotoren gesteuerter Bewegungstisch, auf dem die Probe befestigt ist. Jede Positionierstufe wird über eine Kontrolleinheit mit Echtzeitrechner angesteuert. Die Kontrolleinheiten werden über Ethernet mit einem Steuerrechner verbunden.

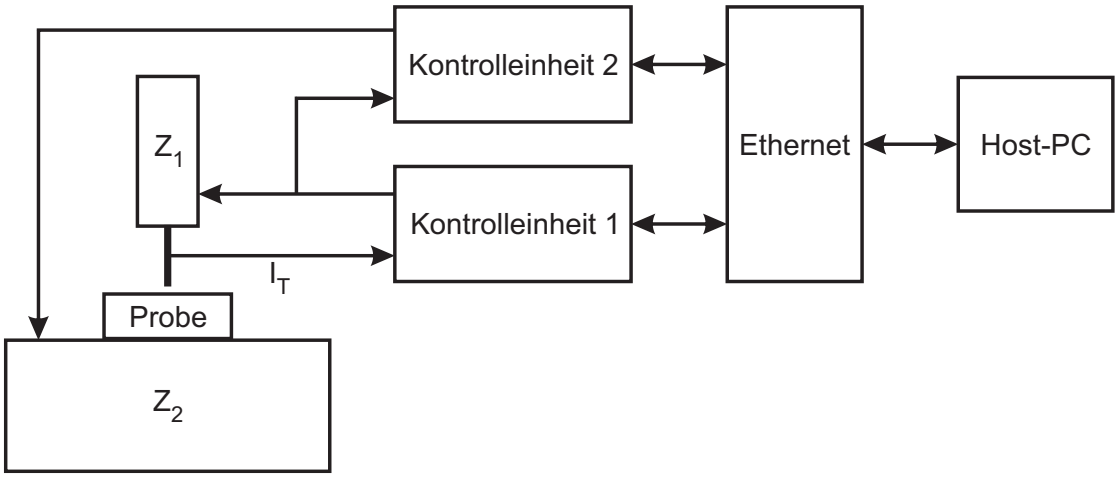


Abbildung 5.7: Funktionsweise der Höhenregelung des Multiskalen-*STM*

Beide Positioniersysteme verfügen über Stellglieder in Z-Richtung. Die Höhenregelung der Tunnelspitze muss nun ihr Regelsignal auf diese Stellglieder aufteilen. Abbildung 5.7 veranschaulicht diesen Prozess. Kontrolleinheit 1 regelt das Feinpositionierglied schnell auf das gemessene Tunnelstromsignal. So folgt die Messspitze den feinen Änderungen der Oberflächentopographie. Kontrolleinheit 2 regelt das Grobpositionierglied langsam auf das Steuersignal der Feinpositionierung. Der Sollwert ist dabei so gewählt, dass die Feinpositionierung auf Mittelstellung gehalten wird. Hierdurch kann das Feinpositionierglied durch starke Änderungen der Oberflächentopographie nicht übersteuert werden. Zusammenführen beider Regelsignale ergibt dann das Oberflächenbild.

Erste Tests dieses Systems werden an Luft und bei Raumtemperatur durchgeführt. Messspitze ist eine elektrochemisch geätzte Wolframspitze. Als Präparat wird ein metallischer Prägestempel für DVDs (DVD-Master) verwendet. Abbildung 5.8A zeigt einen $0,4mm$ x $0,4mm$ messenden Ausschnitt der Oberfläche des DVD-Master. Auf der glatten Fläche sind im oberen Bereich Beschädigungen durch einen Kontakt von Tunnelspitze und Probe zu erkennen. Nach Verkleinern des Scanbereiches

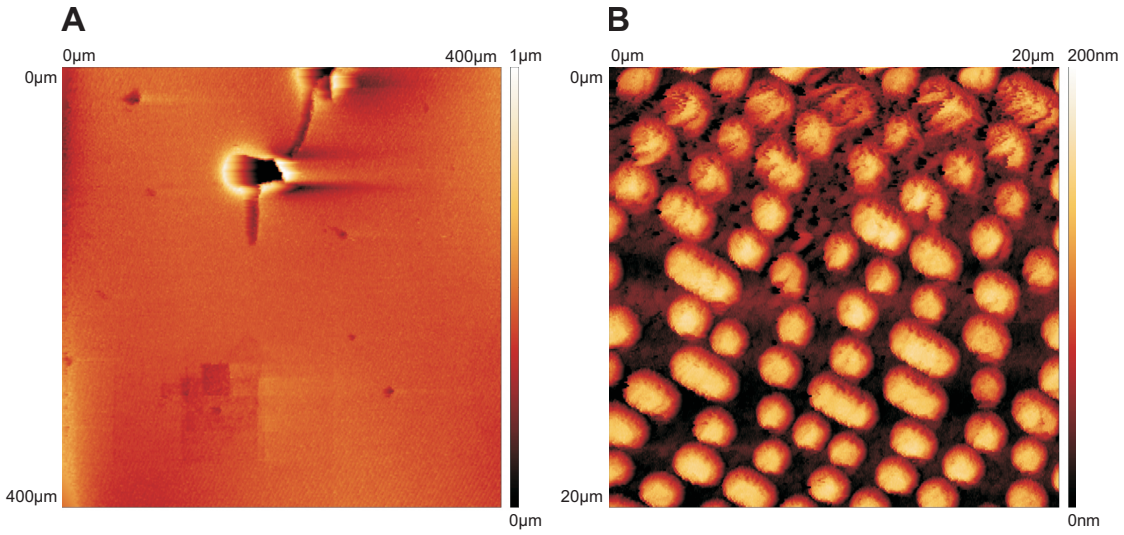


Abbildung 5.8: Oberfläche eines DVD-Masters
A: $I_T = 0,2nA$, $U_T = 10mV$, $t = 525s$ B: $I_T = 0,2nA$, $U_T = 10mV$, $t = 525s$

auf $20\mu m$ x $20\mu m$ werden feine Erhebungen sichtbar, die die Datenbits der späteren DVD repräsentieren. Die einzelnen Erhebungen sind in Spuren angeordnet. Sie haben eine Breite von ca. $500nm$ und eine Höhe von ca. $100nm$. Schon in der Testphase kann das Multiskalen-*STM* also ausgehend von dem Abbildungsbereich eines einfachen optischen Mikroskops einen Größenbereich abbilden, der fünf Größenordnungen umfasst. Dies liegt im Bereich der Leistungsfähigkeit eines Rasterelektronenmikroskopes.

5.3 Praktikums-*STM* für Schülerlabore

Das *Deutsche Museum* in München, die Firma *National Instruments*, die *Ludwig-Maximilians-Universität* (*LMU*) in München und die *Gottfried Wilhelm Leibniz Universität* (*LUH*) in Hannover kooperieren um ausgewählte Schülerlabore mit Tunnelmikroskopiearbeitsplätzen auszustatten. Als Steuerelektronik mit Kontroll- und Auswertesoftware stellt die *LUH* die vorangehend beschriebene Echtzeitsteuerung zur Verfügung. Der mechanische Aufbau des Mikroskopiesystems ist das *Advanced Pocket-size STM*(*AP-STM*) aus der Arbeitsgruppe von *Prof. Heckl* an der *LMU*.

Auf Abbildung 5.9 ist eine Ansicht des *AP-STM* zu sehen. Auf einem über Gummidämpfer verbundenen Metallplattenstapel zur Schwingungsdämpfung ist ein handelsüblichen Röhrenpiezoscanner, die Probe und der Vorverstärker untergebracht. Grobannäherung von Messspitze und Probe erfolgt manuell über zwei Mikrometerschrauben. Das System kann mit einem Metalldeckel gegen elektromagnetische

Abbildung 5.9: Ansicht des *Advanced Pocket-size STM*(*AP-STM*) der *AG Heckl*

Einstreuungen abgeschirmt werden. Das einfache und robuste Design ermöglicht eine Bedienung auch von unerfahrenen Benutzern.

Als Testpräparat für das Tunnelmikroskop wird Trimesinsäure (*TMA*) ($C_9H_6O_6$) in Nonansäure ($CH_3(CH_2)_7COOH$) auf einer *HOPG*-Oberfläche verwendet. *TMA* besteht aus einem Benzolring mit drei substituierten $COOH$-Gruppen. In Lösung bildet diese organische Säure über Wasserstoffbrückenbindungen selbstorganisierte, wabenförmige Schichten auf der *HOPG*-Oberfläche (siehe Abbildung 5.10B und [Lac2005]). Die Messungen erfolgen in Lösung bei Raumtemperatur mit einer gerissenen Platin-Iridium-Spitze. Abbildung 5.10A zeigt ein *STM*-Bild der selbstorganisierten *TMA*-Struktur. Die Abbildungsqualität ist gut, obwohl Tunnelspitze und Probe in einem sehr viel größeren Abstand als bei der Abbildung von reinem *HOPG* gehalten werden. Bei den Tunnelparametern für reines *HOPG* würde die Messspitze die *TMA*-Schichten zerstören.

Nach ausgiebiegen und erfolgreichen Tests ist die Entwicklungsphase des Projektes zur Ausstattung von Schülerlaboren abgeschlossen. Zum Zeitpunkt dieser Arbeit beginnt die nächste Phase des Projektes, die Fertigung der Mikroskopsysteme für die ausgewählten Labore.

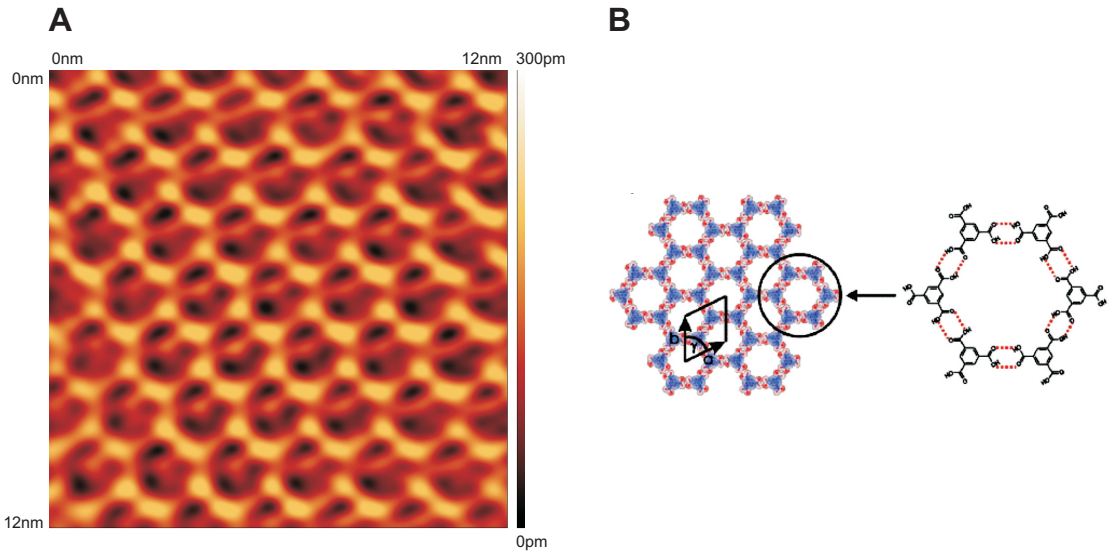


Abbildung 5.10: *TMA* auf *HOPG*
A: $I_T = 0,5nA$, $U_T = 1V$, $t = 11s$ B: $a = b = 1,7nm$, $\gamma = 60°$ (aus [Lac2005])

5.4 Schlussfolgerung

Die entwickelte Echtzeitsteuerung stellt im Einsatz für unterschiedliche Projekte ihre Leistungsfähigkeit unter Beweis. Hohe Stabilität und Flexibilität ermöglichen eine Verwendung im Bereich der Forschung. Robustheit und kostengünstige Konstruktion erweitern das Einsatzgebiet auch auf den Bereich der Lehre. Die in Kapitel 2 gestellen Anforderungen an das System werden voll erfüllt. Neben den besprochenen Anwendungen findet das Steuersystem an der *LUH* auch Verwendung zur Kontrolle eines Rasterkraftmikroskops im physikalischen Praktikum.

Kapitel 6

Rastertunnelmikroskop *STM 150 Aarhus*

In diesem Kapitel wird das Messsystem vorgestellt, welches für die in Kapitel 7 beschriebenen Messungen eingesetzt wird. Da es sich um ein an anderer Stelle ausführlich dokumentiertes kommerzielles System handelt, beschränkt sich die Beschreibung auf einen Überblick der Funktionen und technischen Daten.

6.1 Systembeschreibung

Das Tunnelmikroskop *STM 150 Aarhus* wurde in der Arbeitsgruppe von *Prof. Besenbacher* entwickelt und wird nun kommerziell von der Firma *SPECS* [1] vertrieben (siehe [Lae2001] und [Pet2001]). Es arbeitet im Ultrahochvakuum (UHV) im Temperaturbereich von $90K < T < 400K$. Die maximale abzutastende Bildgröße beträgt $1500nm$ x $1500nm$ bei einer maximalen Abtastrate von 16000 Bildpunkten pro Sekunde. Das Vorverstärkersystem kann Tunnelströme im Bereich von $0,1nA < I_T < 50nA$ verarbeiten.

Abbildung 6.1 zeigt eine Gesamtansicht des Mikroskopsystems. Zu erkennen ist vor allem die UHV-Kammer, die das Mikroksop umgibt. Diese besteht aus einer Hauptkammer (11) und einer Vorkammer (3), die durch ein Schleusenventil verbunden sind. Die Vor- und Hauptkammer werden über eine ölfreie Vorvakuumpumpe (1) und eine Turbomolekularpumpe abgepumpt. Der so erreichte Druck liegt bei $p = 1 \cdot 10^{-9} mbar$. Die Hauptkammer kann zusätzlich mit einer Titansublimator- und einer Ionengetterpumpe gepumpt werden. So kann ein Basisdruck von $p = 2 \cdot 10^{-10} mbar$ eingestellt werden. Die drei Hochvakuumpumpen (14) befinden sich im unteren Teil des Kammergestells. Zur Drucküberwachung

[1] www.specs.de

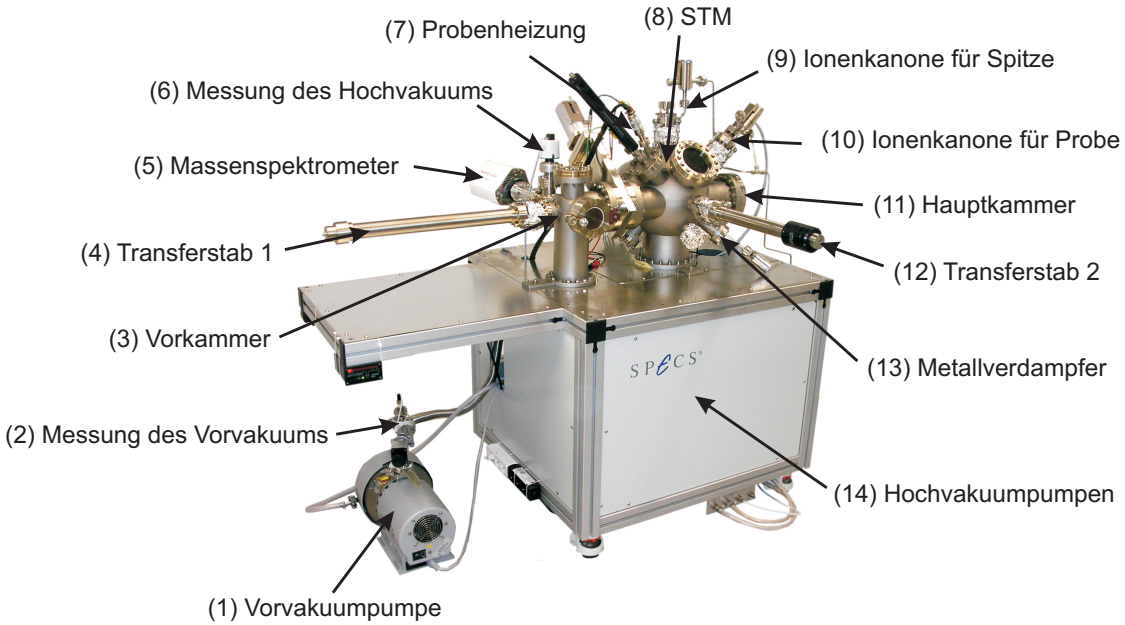


Abbildung 6.1: Gesamtansicht des Rastertunnelmikroskop *STM 150 Aarhus*

ist an der Vorvakuumpumpe ein Vorvakuummessgerät (2) und jeweils an der Vor- und Hauptkammmer ein Hochvakuummessgerät (6) installiert. Außerdem verfügt das System noch über ein Massenspektrometer (5) zur Restgasanalyse. Neben dem Tunnelmikroskop (8) sind an der Hauptkammer noch eine kombinierte Probenheizung und Probengarage (7), ein Metallverdampfer (13) und zwei Ionenkanonen zum Ionenstrahlätzen von Messspitze (9) und Probe (10) angebracht. Zu untersuchende Proben werden in die Vorkammer eingeschleust und mit einem ersten Transferstab (4) in die Hauptkammer eingeführt. Dort können sie mit einem zweiten Transferstab (12) zu den Stationen Tunnelmikroskop, Probenheizung, Probengarage und Ionenkanone gebracht werden.

Abbildung 6.2 zeigt das in die Hauptkammer eingebaute Tunnelmikroskop. Der Piezoscanner (2) mit Messspitze und Probenaufnahme (3) ist in einem Kühlkörper (1) aus Aluminium eingelassen. Der Kühlkörper kann mit einem Kühlstempel von außerhalb des Vakuums mit flüssigem Stickstoff gekühlt werden. Über zwei Zehnerdioden als Heizelemente werden dann der Piezoscanner und die Probe auf die gewünschte Temperatur aufgeheizt. Dies führt jedoch oft zu starker thermischer Drift innerhalb des zu untersuchenden Systems. Über ein aus fünf Stahlfedern bestehendes Schwingungsdämpfungsystem (6) ist der Kühlkörper an einem Vakuumflansch *DN150CF* (4) befestigt. Auch die elektrischen Anschlüsse (5) des Mikroskops werden über diesen Flansch nach außen geführt. Der Vorverstärker für den Tunnelstrom ist direkt auf der Rückseite des Trägerflansches montiert, um einen möglichst kurzen Signalweg herzustellen. Die Unterbringung des Piezoscanners auf einer nicht einmal $1cm$ x $1cm$ großen Grundfläche sorgt für eine hohe mechanische

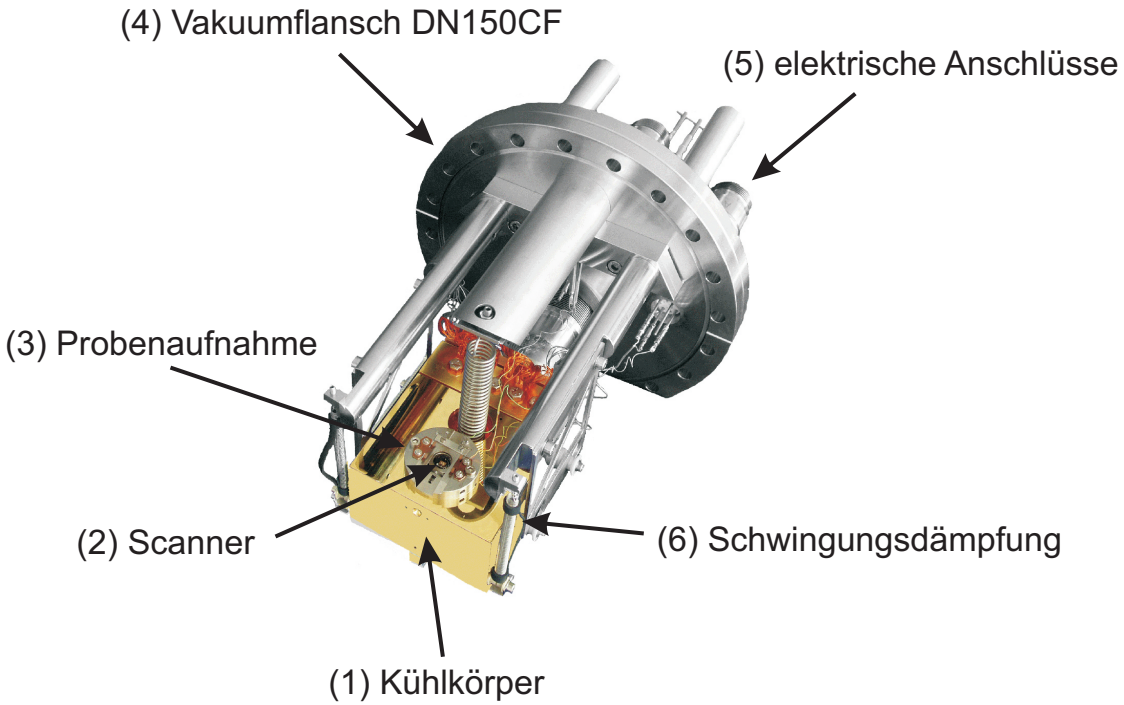


Abbildung 6.2: Scankopf des Rastertunnelmikroskop *STM 150 Aarhus*

Resonanzfrequenz des Systems und lässt so hohe Abtastraten zu. Grobannäherung von Messspitze und Probe erfolgen durch einen Piezomotor unterhalb des Piezoscanners, der Piezoscanner und Messspitze auf die Probenoberfläche zu bewegt.

Kontrolliert wird das Tunnelmikroskop über eine Steuerelektronik, die über eine Schnittstellenkarte mit einem Computer und der zugehörigen Steuersoftware verbunden ist. Zur Untersuchung von dynamischen Vorgängen ermöglicht die Steuersoftware nicht nur das Erfassen von Einzelbildern sondern das Aufnehmen ganzer Bildsequenzen. Eine Driftkorrektur auf Basis automatischer Strukturerkennung hilft hier beim Beobachten ausgesuchter Oberflächenstrukturen über lange Zeiträume. Das von *Specs* gelieferte Softwarepaket stellt jedoch keine Analysefunktionen für die aufgenommenen Bildsequenzen bereit. Dies erfolgt durch eine eigene Softwareentwicklung (siehe Abschnitt 7.1).

6.2 Änderungen am ursprünglichen Aufbau

Um die in Kapitel 7 beschriebenen Messungen durchzuführen, ist es notwendig das bestehende Tunnelmikroskopsystem zu modifizieren. Als wichtigster Schritt wird ein Metallverdampfer zur Beschichtung der Probenoberfläche mit ultradünnen Metallfilmen aufgebaut und montiert. Weiterhin ist es erforderlich die fehlerhaft aus-

geliefert Probenheizung neu zu konzipieren.

6.2.1 Metallverdampfer

Auf Abbildung 6.3 ist der fertige Metallverdampfer zu sehen. Grundlage ist ein Vakuumflansch *DN40CF* (2), auf dem die Halterungen für die Verdampferquellen (3), die elektrischen Durchführungen (5) und eine Drehdurchführung für eine (hier nicht gezeigte) Abschlussblende (1) untergebracht sind. Außerdem ist an der Spitze des Verdampfers eine Quarzwaage (4) installiert.

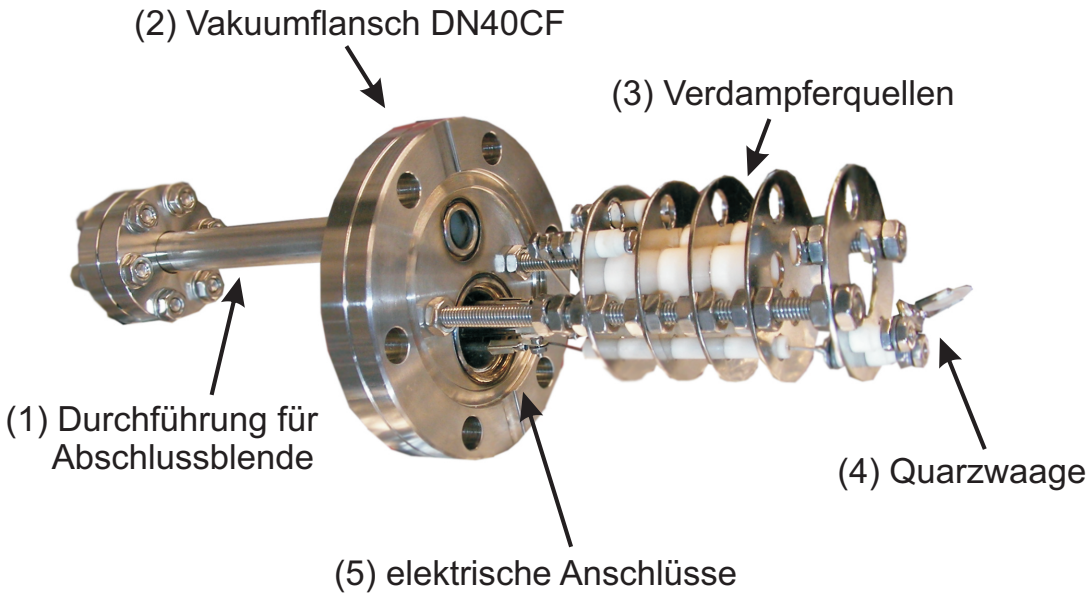


Abbildung 6.3: Ansicht des Metallverdampfers

Der Verdampfer ist mit drei Verdampferquellen bestückt. Jede Quelle besteht aus einer Keramikabschirmung, in der eine Probe des zu verdampfenden Metalls umgeben von einer Wolframwendel befestigt ist. Diese Probe besteht i.A. aus hochreinem Stabmaterial. Im Hochvakuum wird der Metallstab durch einen direkten Stromfluss durch die Wolframwendel aufgeheizt. Durch Erhöhen der Metalltemperatur steigt auch der Dampfdruck des Metalls und es wird ein durch verschiedene Blenden geformter Strahl aus Metallatomen ins Vakuum abgegeben. Bei korrekter Ausrichtung trifft dieser nach einigen Zentimetern auf die vor dem Verdampfer platzierte Probe und die Metallatome lagern sich auf dieser an. Die Heiztemperatur und damit die Aufdampfrate kann über die durch den Stromfluss durch die Wolframwendel vorgegebene Heizleistung beeinflusst werden. Durch die Abschlussblende können die Verdampferquellen mechanisch verschlossen werden. Zur Reinigung von neuem Verdampfermaterial wird der Metallverdampfer einige Stunden blind betrieben, d.h. ohne vorgelagerte Probe und mit geschlossener Blende. Flüchtige Verunreinigungen

werden so aus dem Metall getrieben. Überwacht werden kann die Aufdampfrate über die Quarzwaage. Diese ist ein in Linie zwischen Verdampferquelle und Probe angebrachter Schwingquarz, der über eine Oszillatorschaltung zum Schwingen angeregt wird. Lagern sich nun auch Metallatome auf dem Schwingquarz an, wird dessen Masse und somit dessen Eigenfrequenz geändert. Dadurch ändert sich auch die Schwingungsfrequenz der Oszillatorschaltung messbar. Die Rate der Frequenzänderung ist direkt proportional zur eingestellten Aufdampfrate.

6.2.2 Probenheizung

Die im beschriebenen System verwendete Probenheizung ist eine Elektronenstoßheizung. Durch Glühemission aus einem Filament austretende Elektronen werden durch ein elektrisches Feld in Richtung Probe beschleunigt und heizen diese beim Auftreffen auf. Teile der Filamenthalterung sind aus niedrig schmelzendem Aluminium gefertigt. Ein Anschmelzen dieser Bauteile bei Betrieb der Probenheizung lassen den Kammerdruck auf $p = 1 \cdot 10^{-7} mbar$ fallen und kontaminiert die Probe. Um dieses Problem zu umgehen, wird eine neue Filamenthalterung aus hoch schmelzendem Molybdän gefertigt und ein Molybdänkäfig zur Einfassung der beschleunigten Elektronen auf ihrem Weg vom Filament zur Probe installiert.

6.3 Schlussfolgerung

Das Mikroskopsystem *STM 150 Aarhus* ist ein leistungsfähiges und kompaktes Werkzeug zur Präparation und Untersuchung metallischer Nanostrukturen. Hohe Stabilität und hohe Abtastraten ermöglichen die Analyse der Diffusion und des Zerfalls kleiner Metallclustern aus wenigen Atomen. Langzeitmessungen bei tiefen Temperaturen sind aufgrund des eingesetzten Kühlsystems jedoch nicht möglich.

Kapitel 7

Heteroepitaktische Cu-Inseln auf Ag(100)

Dieses Kapitel befasst sich mit der Präparation (Abschnitt 7.2), dem inneren Aufbau (Abschnitt 7.3) und der Dynamik (Abschnitt 7.4 und Abschnitt 7.5) von Kupfernanostrukturen auf einer Ag(100)-Oberfläche. Diese Nanostrukturen sollen im Folgenden als Inseln bezeichnet werden.

Für die Strukturanalyse werden die Adsorptionsplätze der Cu-Atome bestimmt und es wird ein einfaches Kugelmodell der Oberfläche erstellt. Im Bereich der Dynamik werden Inseldiffusion mit Hilfe der Theorie der *Brownschen Bewegung* und Inselzerfall unter Verwendung der *LSW*-Theorie untersucht. Die ermittelten Ergebnisse werden mit bekannten Daten anderer Inselsysteme verglichen.

7.1 Datenerfassung und -auswertung

Alle Messungen werden an dem in Kapitel 6 beschriebenen Mikroskopsystem durchgeführt. Präparation und Messungen erfolgen im *UHV* bei einem Basisdruck von $p = 2 \cdot 10^{-10} mbar$ und, wenn nicht anders bezeichnet, bei Raumtemperatur. Als Messspitze des Tunnelmikroskops dient eine elektrochemisch geätzte Wolframspitze.

Zur Analyse der Dynamik von Cu-Inseln auf Ag(100) werden Sequenzen von Einzelbildern in festem zeitlichen Abstand (Filme) einer bestimmten Region der zu untersuchenden Oberfläche mit dem Rastertunnelmikroksop aufgenommen. Begrenzt wird die Länge dieser Filme durch die Stabilität der Messspitze, die Konstanz des Ortes des ausgewählten Scanbereiches und die zeitlichen Veränderungen der Oberfläche. Das eingesetzte Mikrokop verfügt über ein System zur Korrektur mechanischer oder elektronischer Bilddrift auf der Basis automatisierter Strukturerkennung.

Eine bestimmte, vorab gewählte Bildstruktur wird von der Steuerelektronik in jedem neu aufgenommenen Bild gesucht und im Scanbereich zentriert. So kann ein einmal ausgesuchter Oberflächenbereich trotz Drift über mehrere Stunden auf einige Nanometer genau verfolgt werden. Nach ca. zwei Tagen Messzeit sammeln sich allerdings so viele Verunreinigungen auf der Oberfläche, dass das System neu präpariert werden muss.

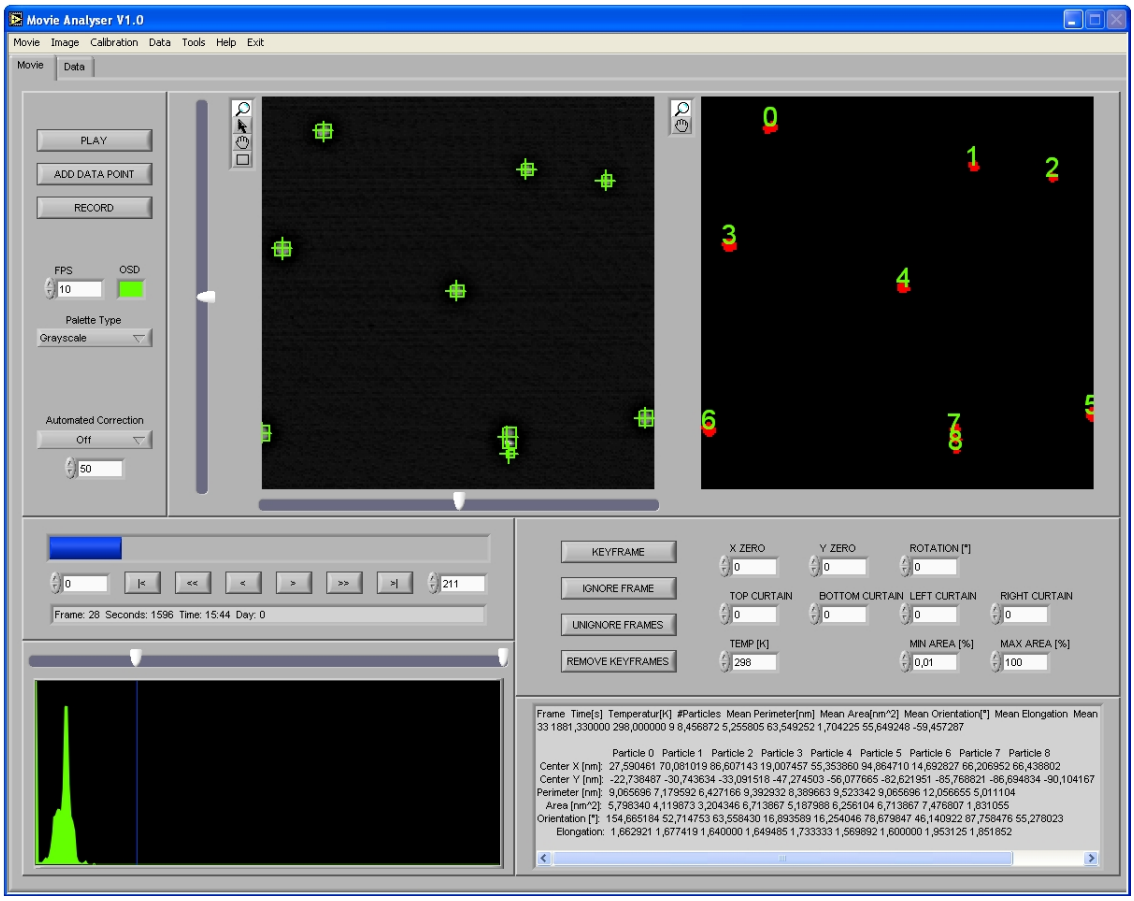


Abbildung 7.1: Software zur Analyse des Filmmaterials

Die Rohdaten der Messungen bestehen aus insgesamt ca. 3400 Einzelbildern aus über 46 Stunden Filmmaterial. Zur Auswertung dieser Datenmengen kommt ein eigens hierfür auf *LabVIEW*-Basis entwickeltes Programm zum Einsatz (Abbildung 7.1). Besonders wichtig für die Datenanlyse ist eine genaue Bestimmung der Inselpositionen. Aufgrund einer in den Rohdaten enthaltenen Restdrift des Scanbereiches ist dies nicht ohne weiteres möglich. Deswegen korrigiert das Auswerteprogramm als erstes diese verbleibende Drift über manuell festgelegte Fixpunkte innerhalb der Bildsequenzen. Ebenfalls wird eine mögliche Verkippung der Einzelbilder gegenüber der Grundfläche entfernt. Danach extrahiert die Software über einen einstellbaren Höhenschwellenwert die Größen- und Positionsinformationen der erfassten Kupferinseln. Als Inseln gelten hierbei alle Bildbereiche, deren Höhen den gewählten

Höhenschwellenwert übersteigen. Die so gewonnenen Datensätze verarbeiten weitere Module zur Diffusions- (siehe Abschnitt 7.4) und Zerfallsanalyse (siehe Abschnitt 7.5).

Eine Übersicht über die ausgewerteten Filme sowie eine Daten-CD mit den Filmen im *AVI*-Format ist im Anhang zu finden (Anhang B).

Standbilder zur Bestimmung der Struktur der Kupferinseln werden mit der freien Software *WSXM* ausgewertet (siehe [Hor2007]). Längenkalibrierung erfolgt an der Gitterstruktur und Höhenkalibrierung an der Höhe der Stufenkanten der Ag(100)-Oberfläche.

7.2 Präparation des Systems

Als Substrat für die Messungen wird ein Silbereinkristall verwendet, dessen (100)-Kristallfläche mechanisch vorpoliert ist. Diese Kristallfläche wird vor jeder Messung durch Zyklen von Ionenstrahlätzen und Aufheizen auf atomarer Ebene gereinigt und geglättet. Das Ionenstrahlätzen geschieht durch Beschuss der Silberoberfläche mit Argonionen bei einem Argonpartialdruck von $p = 5 \cdot 10^{-5} mbar$. Die Ionen tragen die ersten Lagen der Oberfläche zusammen mit eingelagerten Verunreinigungen ab. Die dabei entstehenden, unregelmäßigen Vertiefungen in der Oberfläche werden durch Heizen des Kristalls bis kurz unter seine Schmelztemperatur ausgeheilt. Tabelle 7.1 listet die typischen Schritte zur Oberflächenpräparation in ihrer zeitlichen Abfolge auf. Diese Art der Oberflächenreinigung wird für Metalle im *UHV* schon seit Jahren erfolgreich angewendet (siehe [Mus1982] und [Rob1963]).

Präparationsschritt	**Dauer** $[min]$	**Temperatur** $[K]$
Ar^+ @ $1,3keV$	20	293
Heizen	3	950
Ar^+ @ $1,3keV$	3	293
Heizen	$1,5$	800

Tabelle 7.1: Typischer Präparationsablauf zur Reinigung der Ag(100)-Oberfläche

Abbildung 7.2 zeigt die Ag(100)-Oberfläche nach der Präparation. Große Terrassen mit einer Breite von ca. $200nm$ wechseln sich mit Bündeln von Stufenkanten ab. Verunreinigungen der Oberfläche sind so gut wie keine auszumachen. Die Terrassen sind in etwa doppelt so breit wie die Kantenlänge der analysierten Bildsequenzen. Vor Aufbringen der Cu-Inseln wird die Oberflächenpräparation jedesmal auf den gezeigten Größenskalen auf Reinheit überprüft.

Die Kupferinseln werden mit dem in Abschnitt 6.2.1 beschriebenen Metallverdampfer bei Raumtemperatur auf die Silberoberfläche aufgebracht. Hierbei werden Bedeckungen von $0,003$ bis $0,13$ Monolagen (Ml) bei Aufdampfraten von $0,001 Ml/min$

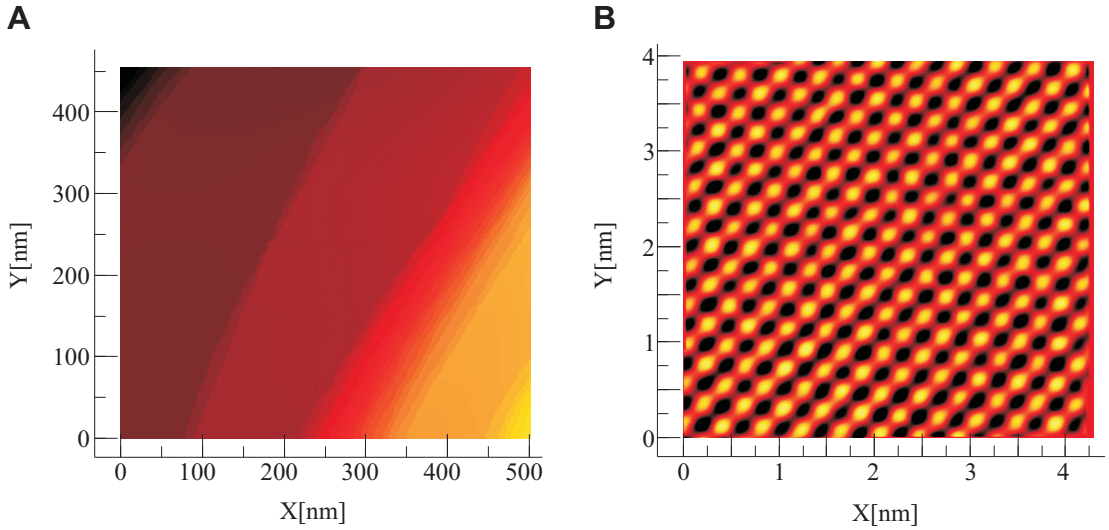


Abbildung 7.2: Ag(100)-Oberfläche nach erfolgreicher Präparation
A: $I_T = 1,32nA$, $U_T = 940mV$, $t = 175s$ B: $I_T = 0,87nA$, $U_T = 884mV$, $t = 30s$

bis $0,01Ml/min$ erreicht. Hierbei entspricht eine Monolage einer Oberflächenbedeckung von 100%. Im Verlauf des Beschichtungsprozesses steigt der Kammerdruck nicht über $p = 2 \cdot 10^{-9}mbar$ an.

Ein Großteil des aufgebrachten Kupfers bildet zusammenhängende Inseln, die von dem Tunnelmikroskop abgebildet werden können. Ein kleinerer Teil des Kupfers liegt als schnell diffundierende Einzelatome auf der Silberoberfläche vor und kann aufgrund der starken atomaren Eigenbewegung nicht vom Tunnelmikroskop erfasst werden. Die Gesamtheit dieser Atome bildet ein zweidimensionales Oberflächengas (Adatomgas). Dieser Gaszustand kann Atome an Insel und Stufenkanten abgeben oder sie von ihnen aufnehmen.

7.3 Struktur der Cu-Inseln

Silber bildet eine *fcc*-Kristallstruktur [1] mit einer Gitterkonstante von $a_{Ag} = 407,6pm$ (siehe Abbildung 7.6). Die natürliche Kristallstruktur von Kupfer ist ebenfalls ein *fcc*-Kristall mit einer Gitterkonstanten von $a_{Cu} = 361,5pm$. Für das heteroepitaktische Wachstum von Kupfer auf Silber bedeutet dies eine Gitterfehlanpassung von ca. 13%. Die Ag(100)-Oberfläche ist eine quadratische Oberfläche mit einer Gitterkonstante von $l_{Ag} = 1/\sqrt{2}a_{Ag} = 288,2pm$.

Abbildung 7.3 zeigt die Silberoberfläche nach Aufbringen von ca. $0,008Ml$ Kupfer

[1] *Face-Centered-Cubic*-Kristalle besitzen eine würfelförmige Einheitszelle an deren Ecken und Außenflächenmittelpunkten sich jeweils ein Atom befindet.

bei Raumtemperatur. Die sich bildenden Inseln weisen eine quadratische Gleichgewichtsform auf. Im Höhenprofil lassen sich zwei Typen von Inseln unterscheiden: Der erste Inseltyp besitzt eine Höhe ähnlich der Stufenkantenhöhe, bei dem zweiten Inseltyp ist die Inselhöhe erkennbar niedriger. Beide Inselarten bestehen nur aus einer Lage Kupferatomen.

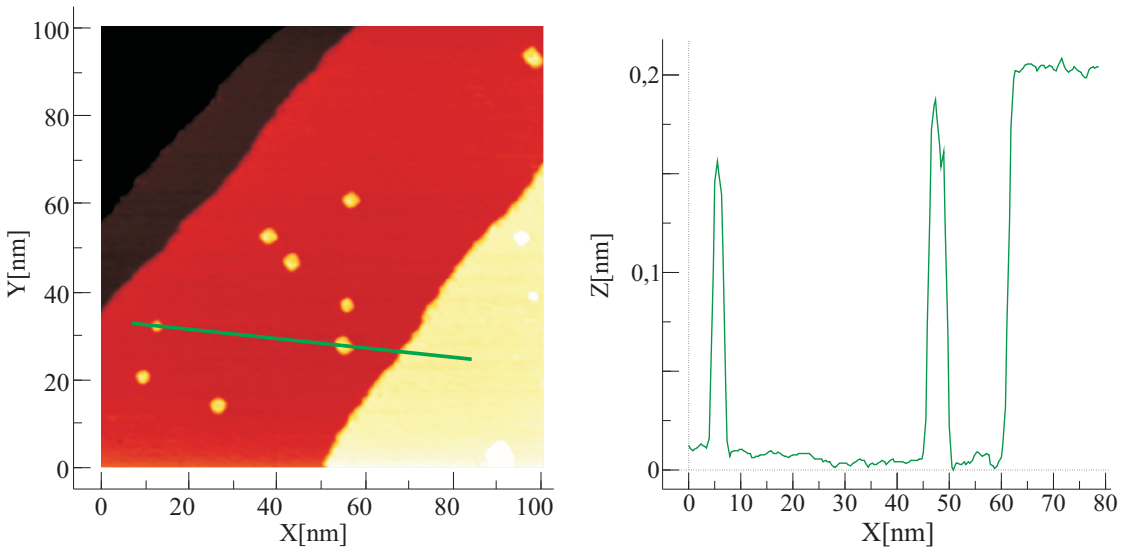


Abbildung 7.3: Cu-Inseln auf Ag(100), $I_T = 0,78nA$, $U_T = 782mV$, $t = 40s$

Neben den Höhendifferenzen finden sich auch Unterschiede in den Adsorptionsplätzen der Kupferatome der einzelnen Inseln. In Abbildung 7.4 sind Ausschnitte der Inseloberflächen in atomarer Auflösung gezeigt. Diesen Ausschnitten sind die Positionen der Atome der Silberunterlage überlagert. Die Atome der hohen Cu-Inseln (Abbildung 7.4B) besetzen die vierfach koordinierten Muldenplätze der Ag(100)-Oberfläche. Die Atome der niedrigen Cu-Inseln (Abbildung 7.4A) besetzen die Brückenplätze zwischen zwei Atomen der Ag(100)-Oberfläche. Der Atomabstand innerhalb der beider Inselsorten entspricht mit $l = (280 \pm 10)pm$ dem Gitterabstand der Silberoberfläche. Die Cu-Inseln wachsen also pseudomorph auf dem Substrat.

Bestimmender Parameter für Höhen- und Adsorptionsplatzunterschied ist die Grundfläche A der Kupferinseln. Abbildung 7.5 zeigt eine Messung der Inselhöhe h gegen die Grundfläche A (schwarze Rechtecke). h ist hierbei der Höhenmittelwert über die gesamte Inselfläche. In einem Flächenbereich von $1nm^2 < A < 7nm^2$ besitzen die Inseln eine Höhe von $h = (154 \pm 3)pm$. Bei $A = 7nm^2$ gibt es einen scharfen Übergang zu einer Höhe $h = (186 \pm 2)pm$. Dies entspricht der Stufenhöhe von reinem Kupfer. Ebenso findet eine Studie mit elektrochemischen *STM* eine Inselhöhe von $h = (170 \pm 20)pm$ für einlagige Kupferinseln auf einer Ag(100)-Oberfläche (siehe [Die1998]).

In das Diagramm eingetragen sind auch Messpunkte mit gleichzeitiger Bestimmung der Adsorptionsplätze. Bis $A = 7nm^2$ befinden sich die Kupferatome auf

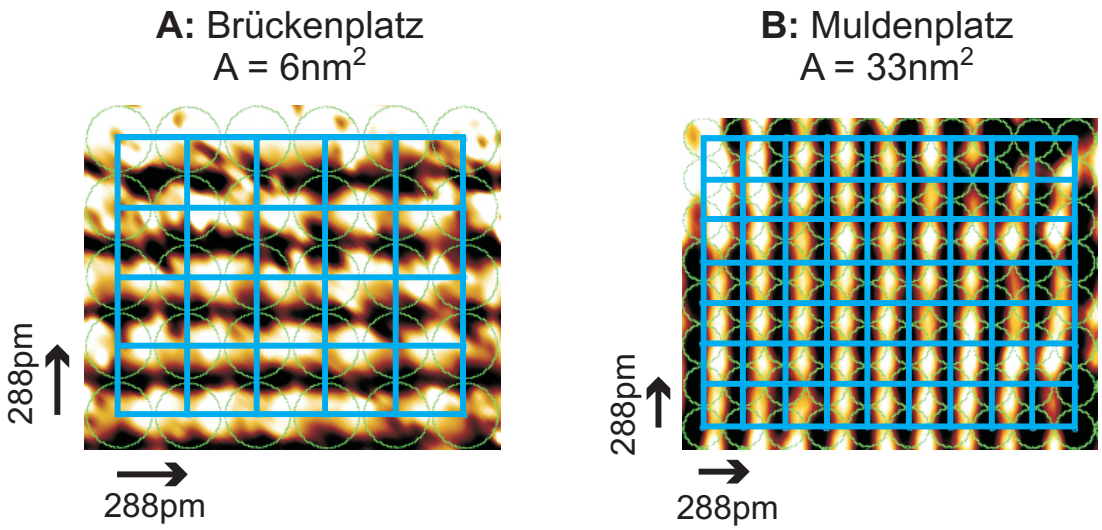


Abbildung 7.4: Atomare Auflösung auf Cu-Inseln mit $A = 6nm^2$ und $A = 33nm^2$ A: $I_T = 0,78nA$, $U_T = 806mV$, $T = 224K$ B: $I_T = 0,85nA$, $U_T = 857mV$, $T = 220K$

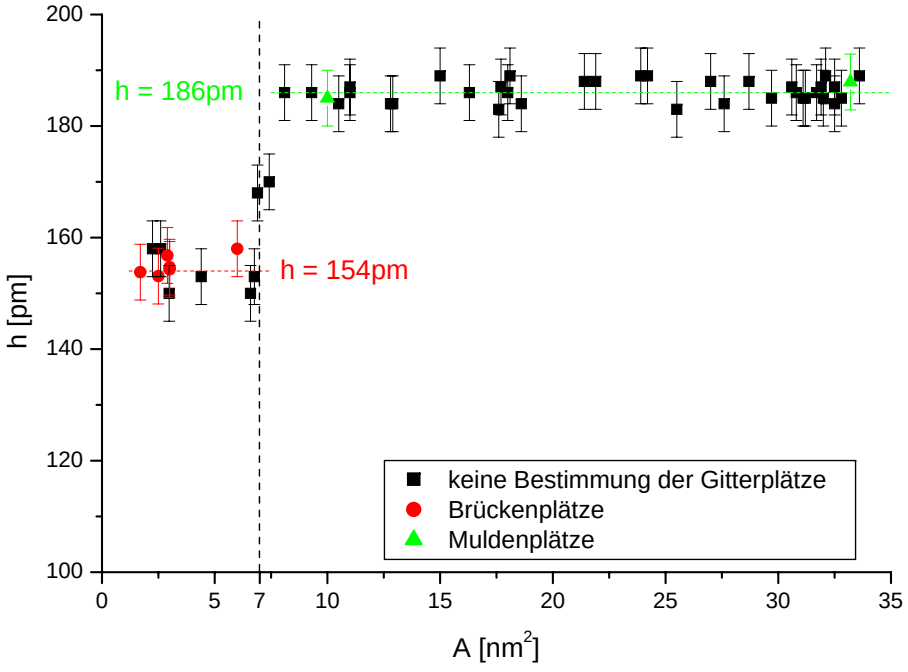


Abbildung 7.5: Höhe h der Cu-Inseln gegen ihre Grundfläche A

den Brückenplätzen der Ag(100)-Oberfläche (rote Kreise). Von da an besetzen sie die Muldenplätze (grüne Dreiecke).

Mit diesen Informationen wird ein einfaches Kugelmodell der Cu-Inseln auf der Silberoberfläche erstellt (Abbildung 7.6). Relaxations- und Rekonstruktionseffekte werden in dem Modell und besonders für die daraus bestimmten Abstände nicht berücksichtigt. Der geometrische Höhenunterschied aus dem Modell zwischen Inseln auf den Brückenplätzen und Inseln auf den Muldenplätzen beträgt $\Delta h_{GEO} = +51pm$. D.h. die kleineren Inseln sollten höher erscheinen. Der gemessene Höhenunterschied ist jedoch $\Delta h_{STM} = (-32 \pm 5)pm$. D.h. die kleineren Inseln erscheinen niedriger. Dies ist ein starkes Indiz dafür, dass mit der Änderung des Adsorptionsplatzes bei $A = 7nm^2$ eine gleichzeitige Änderung der elektronischen Struktur der Kupferinseln einhergeht. Da das Tunnelmikroskop im Prinzip Flächen gleicher Elektronendichte abbildet, kann eine elektronische Umordnung zu solch einer scheinbaren Höhenänderungen führen.

Bemerkenswert ist, dass dieser Übergang bei relativ großen Inseln stattfindet. Die Fläche $A = 7nm^2$ entspricht einer quadratischen Insel von ca. neun mal neun Atomen, also einer Anordnung von insgesammt 81 Kupferatomen. Die kritische Länge von neun Atomen taucht in heteroepitaktischen Kupfersystemen nocheinmal an anderer Stelle auf. Bei Wachstum von Kupfer auf Ag(100)- und Au(100)-Oberflächen im elektrochemischen *STM* wechselt der Wachstumsmodus von *bcc*-Kupfer [2] auf *fcc*-Kupfer ab der neunten bzw. zehnten aufgebrachten Monolage ([Die1998], [Ran2000]).

[2] *Body-Centered-Cubic*-Kristalle besitzen eine würfelförmige Einheitszelle an deren Ecken und Raumdiagonalenschnittpunkt sich jeweils ein Atom befindet.

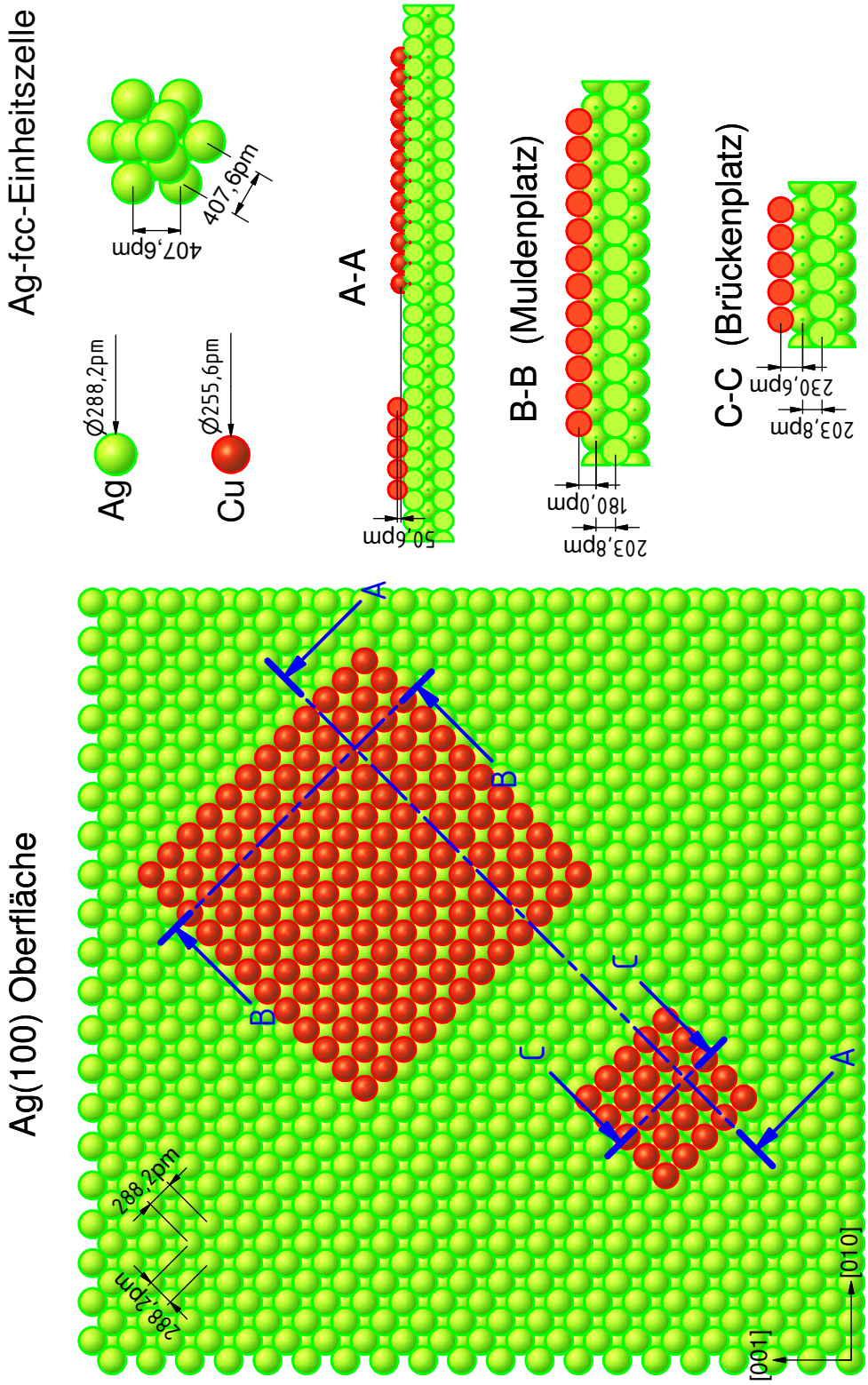


Abbildung 7.6: Kugelmodell der Cu-Inseln auf der Ag(100)-Oberfläche

7.4 Diffusion der Cu-Inseln

Bei Raumtemperatur wandern die Kupferinseln in einer zufälligen Bewegung über die Silberoberfläche (*Brownsche Bewegung*). Diese Bewegung wird durch die Diffusionskonstante D charaktaresiert.

$$W_{1D}(\Delta x, \Delta t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi D \Delta t}} e^{-\frac{(\Delta x)^2}{4D\Delta t}} \quad \text{mit} \quad \Delta x = x - x_0 \ , \ \Delta t = t - t_0 \tag{7.1}$$

Gleichung 7.1 gibt die Wahrscheinlichkeit an, mit der ein Teilchen, das sich zum Zeitpunkt t_0 bei Position x_0 befindet, zum Zeitpunkt $t > t_0$ an Position x zu finden ist (siehe [Ein1905] und [Smo1906]). Die Gleichung bezieht sich auf eine zufällige, eindimensionale Bewegung. Die berechnete Wahrscheinlichkeitsverteilung ist eine Gaußverteilung, deren Breite proportional zur Diffusionskonstante D und zum Zeitintervall Δt ist. Diese Abhängigkeit drückt sich auch in der *Einstein*-Relation aus, die man durch Mittelwertsbildung von Δx erhält:

$$\left\langle (\Delta x)^2 \right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d(\Delta x)(\Delta x)^2 W_{1D}(\Delta x, \Delta t) = 2D\Delta t \tag{7.2}$$

Durch Kombination zweier eindimensionaler Bewegungen kann die Theorie auch auf den zweidimensionalen Fall erweitert werden. Hierbei wird eine einheitliche Diffusionskonstante D in x- wie auch in y-Richtung angenommen.

$$W_{2D}(\Delta \vec{r}, \Delta t) = W_{1D}(\Delta x, \Delta t) \cdot W_{1D}(\Delta y, \Delta t) = \frac{1}{4\pi D \Delta t} e^{-\frac{(\Delta \vec{r})^2}{4D\Delta t}} \quad \text{mit} \quad \Delta \vec{r} = \begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta y \end{pmatrix} \tag{7.3}$$

Die Diffusionskonstante D ist abhängig von der Grundfläche A der Adatominseln und der Umgebungstemperatur T (siehe [Vot1986]).

$$D \propto e^{-\frac{E_0}{k_B T}} A^{-\alpha} \tag{7.4}$$

Hierbei ist E_0 die Energiebarriere zur Aktivierung der Inseldiffusion und k_B die *Boltzmann*-Konstante.

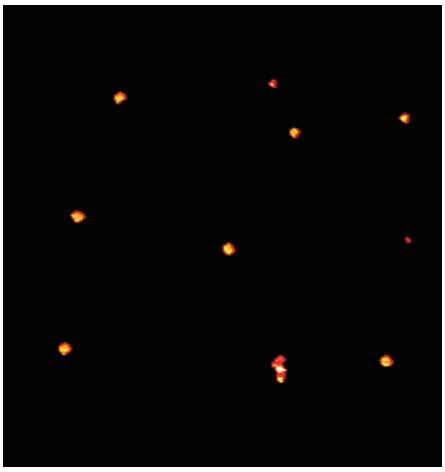
Die Abhängigkeit der Diffusionskonstante von der Inselfläche soll nun weiter untersucht werden. Durch Modellierung der Diffusion auf atomarer Ebene können drei Diffusionsmechanismen (Peripheriediffusion, Terrassendiffusion und kondensationslimitierte Diffusion) identifiziert werden, die jeweils zu anderen Exponenten α in Gleichung 7.4 führen (siehe [Kha1996]). Alle diese Prozesse basieren auf der unabhängigen Bewegung einzelner Kupferatome. Bei der Peripheriediffusion (PD) bewegt sich die Insel durch Diffusion einzelner Atome entlang der Inselränder. Dies führt zu einem Exponenten $\alpha = 3/2$. Terrassendiffusion (TD) und kondensationslimitierte Diffusion (ED) beschreiben als Ursache der Inselbewegung Anlagern und Abdampfen einzelner Atome aus bzw. in das auf der Oberfläche vorhandene Adatomgas. Bei der Terrassendiffusion ist der ratenlimiterende Prozess die Diffusion der Einzelatome über die Substratoberfläche. Es ergibt sich $\alpha = 1$. Ratenlimitierend für die kondensationslimitierte Diffusion ist das Anlagern und Abdampfen von Adatomen. Der Exponent hierfür ist $\alpha = 1/2$.

Messungen an Kupferinseln auf einer Cu(100)-Oberfläche und Silberinseln auf einer Ag(100)-Oberfläche bestimmen den gesuchten Exponenten für Kupfer zu $\alpha_{Cu} = 1,25 \pm 0,04$ und für Silber zu $\alpha_{Ag} = 1,14 \pm 0,05$ (siehe [Pai1997]). Vermessen wurden Inseln in einem Größenbereich von $7nm^2 < A < 90nm^2$. Eine *Monte-Carlo*-Simulation ermittelt für Cu-Inseln auf einer Cu(100)-Oberfläche im Größenbereich $0,7nm^2 < A < 7nm^2$ einen Exponenten $\alpha_{Cu} = 1,5$ (siehe [Jah2005]). Für den real ablaufenden Diffusionsprozess legt dies eine Mischung aus Peripherie- und Terrassendiffusion nahe. Neuere theoretische Berechnungen und Simulationen weisen darauf hin, dass der Exponent α für große Werte von A gegen eins, also in Richtung Terrassendiffusion, strebt (siehe [Hei1999]).

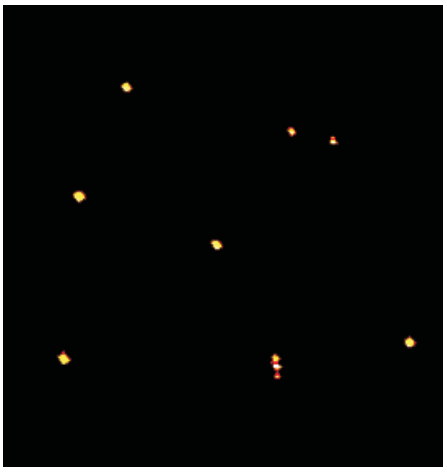
Für sehr kleine Werte von A verlieren die vorgestellten drei Diffusionsprozesse an Bedeutung. Für Metallinseln bis einer Größe von zehn Atomen zeigen *Monte-Carlo*-Simulationen einen deutlichen Anstieg von α (siehe [Tru2001], [Sal2001] und [Kar2006]). Dies ist auf das Auftreten kollektiver Atombewegungen in diesem Größenbereich zurückzuführen. Verbundene Bewegungen einzelner Inselteile aber auch der gesamten Insel sind möglich.

Um die Dynamik der Cu-Inseln experimentell zu untersuchen, werden Bildsequenzen mit einem festen zeitlichen Abstand zwischen den Bildern von einer Probenregion mit ausreichender Inselbedeckung mit dem Tunnelmikroskop aufgenommen. Das Auswerteprogramm extrahiert dann aus diesen Daten die Größe und Position jeder Insel im zeitlichen Verlauf (siehe Abschnitt 7.1). Abbildung 7.7 zeigt sechs Bilder im Abstand von $0,6$ Stunden aus solch einer Bildsequenz. Neben den Diffusionsbewegungen ist auch eine Größenabnahme der einzelnen Inseln zu erkennen, die schließlich zum vollständigen Zerfall der Inseln führt.

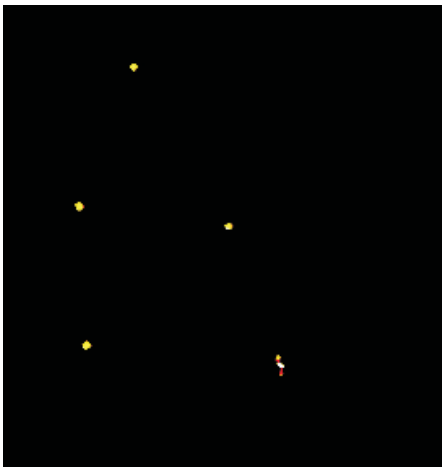
Zur Bestimmung der Diffusionskonstante D wird als erstes die zeitliche Entwicklung in eine Abfolge von Abschnitten geteilt, in denen sich die Inselfläche nicht mehr als um den vorher gewählten Betrag ΔA ändert. Jedem dieser Bereiche wird ein



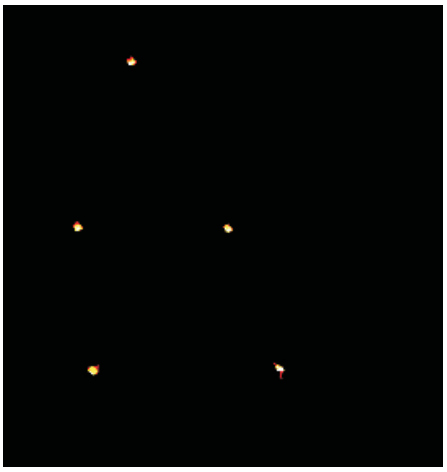
100nm x 100nm, t=0h



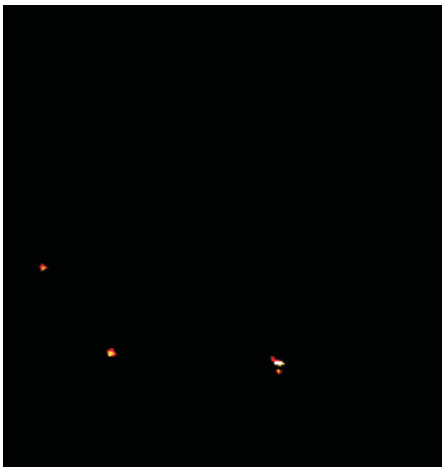
100nm x 100nm, t=0,6h



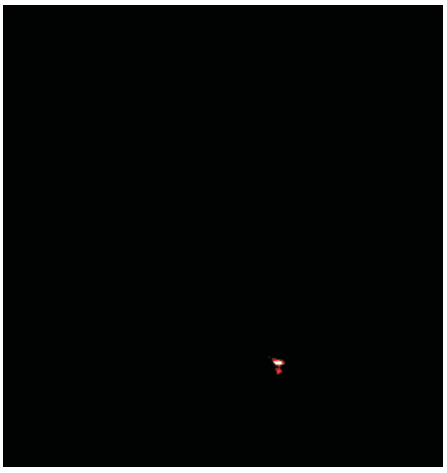
100nm x 100nm, t=1,2h



100nm x 100nm, t=1,8h



100nm x 100nm, t=2,4h



100nm x 100nm, t=3,0h

Abbildung 7.7: Zeitliche Entwicklung einiger Cu-Inseln, $I_T = 0,41nA$, $U_T = 570mV$

Flächenmittelwert A und ein Flächenfehler $Err(A) = \Delta A/2$ zugeordnet. Für jeden Abschnitt mit zugehöriger Fläche A wird nun eine einzelne Diffusionskonstante D bestimmt.

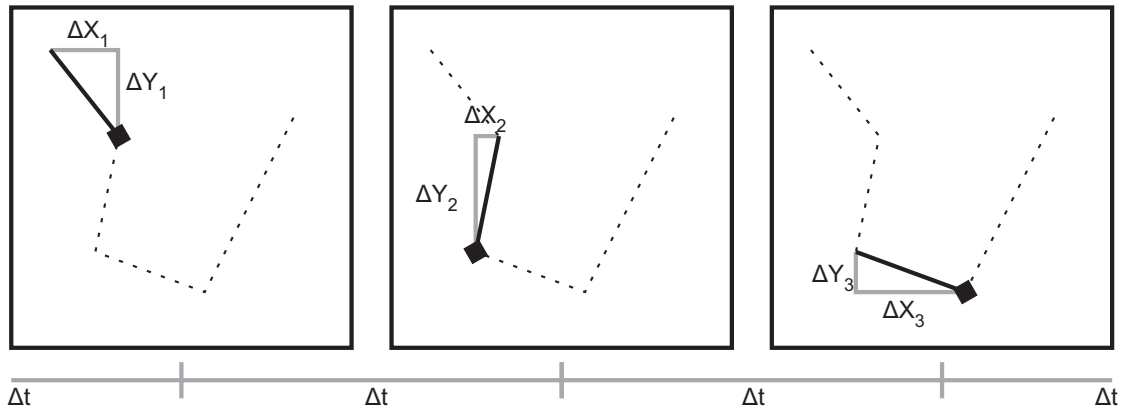


Abbildung 7.8: Zur Bestimmung der Diffusionskonstante

Abbildung 7.8 veranschaulicht die Ermittlung der einzelnen Diffusionskonstanten. Für einen Abschnitt der Bildsequenz mit n Bildern im zeitlichen Abstand von Δt wird die Inselbewegung in eine Bewegung in x- und y-Richtung zerlegt und die Quadrate der Abstandsänderungen $(\Delta x_1)^2$ bis $(\Delta x_n)^2$ und $(\Delta y_1)^2$ bis $(\Delta y_n)^2$ nach jeweils Ablauf der Zeit Δt bestimmt. Daraus ergeben sich die mittleren quadratischen Abweichungen $\langle(\Delta x)^2\rangle$ und $\langle(\Delta y)^2\rangle$.

$$\left\langle(\Delta x)^2\right\rangle = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(\Delta x_i)^2 \ , \ \left\langle(\Delta y)^2\right\rangle = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(\Delta y_i)^2 \tag{7.5}$$

Die entsprechenden Fehler sind hierbei:

$$\begin{aligned} Err\left(\left\langle(\Delta x)^2\right\rangle\right) &= \sqrt{\frac{1}{n(n-1)}\sum_{i=1}^{n}\left((\Delta x_i)^2 - \langle(\Delta x)^2\rangle\right)^2} \\ Err\left(\left\langle(\Delta y)^2\right\rangle\right) &= \sqrt{\frac{1}{n(n-1)}\sum_{i=1}^{n}\left((\Delta y_i)^2 - \langle(\Delta y)^2\rangle\right)^2} \end{aligned} \tag{7.6}$$

Außer für die ursprüngliche Zeitdifferenz Δt der Bildsequenz werden die mittleren quadratischen Abweichungen $\langle(\Delta x)^2\rangle$ und $\langle(\Delta y)^2\rangle$ auch für jedes zweite, jedes dritte usw. Bild bestimmt. Anhand dieser Daten wird der von der *Einstein*-Relation (Gleichung 7.2) geforderte proportionale Zusammenhang zwischen $\langle(\Delta x)^2\rangle$ bzw. $\langle(\Delta y)^2\rangle$ und Δt überprüft. Abbildung 7.9 zeigt diese Auswertung exemplarisch an einer

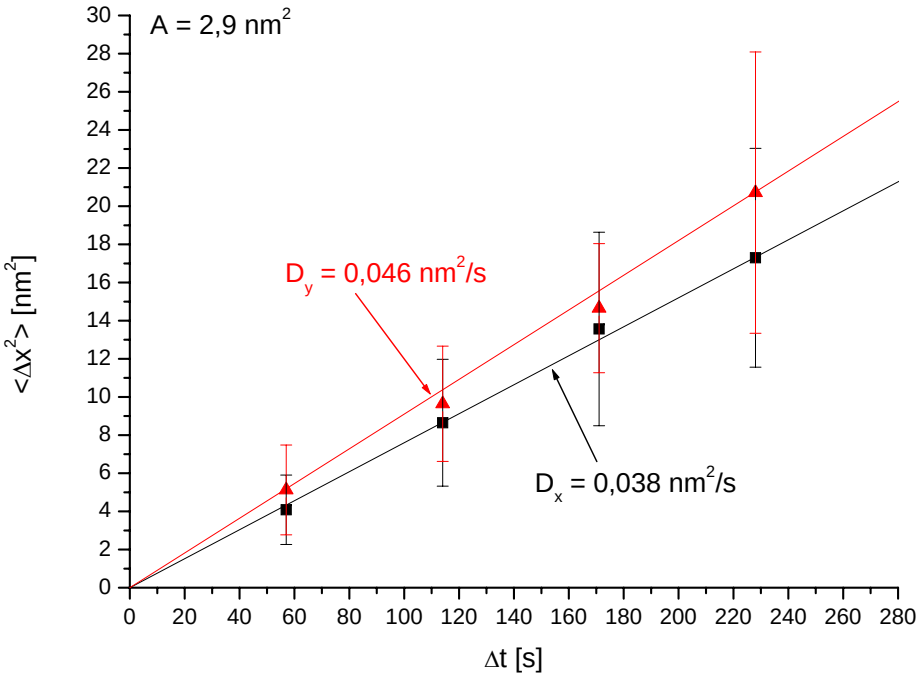


Abbildung 7.9: Überprüfung der *Einstein*-Relation für eine Cu-Insel mit $A = 2,9nm^2$

Cu-Insel mit $A = 2,9nm^2$. Ist wie im gezeigten Beispiel die Proportionalitätsbedingung erfüllt, wird D aus der Proportionalitätskonstante bestimmt. Zur Fehlerminimierung werden hierzu nur die Messpunkte verwendet, die mit der ursprünglichen Zeitdifferenz der Bildsequenz, also einer maximalen Anzahl von Bildern, bestimmt wurden.

$$D = \frac{D_x + D_y}{2} = \frac{1}{2}\left(\frac{\langle(\Delta x)^2\rangle}{2\Delta t} + \frac{\langle(\Delta y)^2\rangle}{2\Delta t}\right) = \frac{1}{4\Delta t}\left(\langle(\Delta x)^2\rangle + \langle(\Delta y)^2\rangle\right) \tag{7.7}$$

Der Fehler der so berechneten Diffusionskonstante D ergibt sich nach Folgefehlerrechnung zu:

$$Err(D) = \frac{1}{4\Delta t}\sqrt{\left[Err\left(\langle(\Delta x)^2\rangle\right)\right]^2 + \left[Err\left(\langle(\Delta y)^2\rangle\right)\right]^2} \tag{7.8}$$

In Abbildung 7.10A sind die nach der oben vorgestellten Methode ermittelten Diffusionskonstanten D in Abhängigkeit der Inselfläche A dargestellt. Messwerte werden in einem Größenbereich von $1nm^2 < A < 40nm^2$ aufgenommen. Die zugehörigen Diffusionskonstanten erstrecken sich über einen Wertebereich von $1 \cdot 10^{-4}nm^2/s < D < 1nm^2/s$. Die anhand einer unbewegten Struktur bestimmte Auflösungsschwelle des Messsystems liegt bei $D_{LOW} = 5 \cdot 10^{-5}nm^2/s$. In der doppeltlogarithmischen Darstellung lassen sich zwei Bereiche des Graphen erkennen, die jeweils einem linearen Verlauf folgen. Um den gesuchten Exponenten α aus Gleichung 7.4 zu bestimmen, wird die Funktion 7.9 durch nichtlineare Kurvenanpassung mit den Parametern α und b an die beiden Bereiche des Graphen angepasst. Der Parameter b ist hierbei der Proportionalitätsfaktor aus Gleichung 7.4.

$$\log(D) = \log(b) - \alpha \log\left(\frac{A}{l^2}\right) \quad \text{mit } l = 0,2882nm \tag{7.9}$$

System	**Flächenbereich** $[nm^2]$	α	$b[\frac{nm^2}{s}]$
Cu/Ag(100)	$2-6$	$3,9 \pm 0,8$	$(4 \pm 2) \cdot 10^4$
Cu/Ag(100)	$11-40$	$1,26 \pm 0,14$	$0,4 \pm 0,2$
Cu/Cu(100)	$7-90$	$1,25 \pm 0,04$	$0,60 \pm 0,13$
Ag/Ag(100)	$7-90$	$1,14 \pm 0,05$	$0,19 \pm 0,05$

Tabelle 7.2: Ergebnisse der Kurvenanpassung von Gleichung 7.9 an Graphen 7.10 Die Daten für Cu/Cu(100) und Ag/Ag(100) stammen aus [Pai1997]

Tabelle 7.2 listet die Ergebnisse der Kurvenanpassung auf. Im Bereich $11nm^2 < A < 40nm^2$ ergibt sich $\alpha = 1,26 \pm 0,14$. Dies passt sehr gut zu den oben erwähnten Messergebnissen von Cu-Inseln auf einer Cu(100)-Oberfläche bzw. Ag-Inseln auf

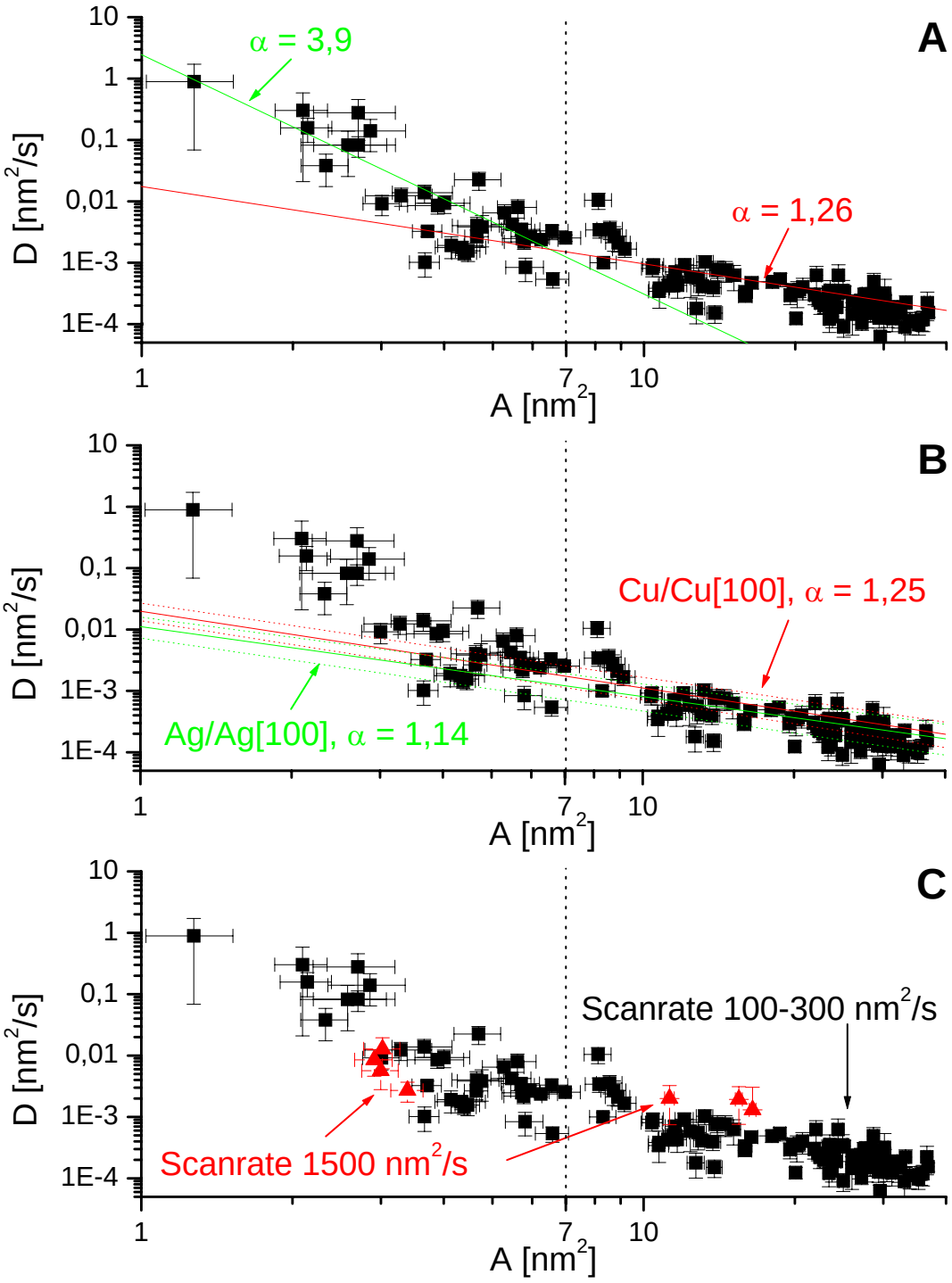


Abbildung 7.10: Diffusionskonstante D gegen Inselfläche A

einer Ag(100)-Oberfläche (Abbildung 7.10B). Im vorliegenden heteroepitaktischen System muss die Inseldiffusion in diesem Größenbereich durch die gleichen Prozesse bestimmt sein wie in den entsprechenden homoepitaktischen Systemen. Für Inseln im Flächenbereich $2nm^2 < A < 6nm^2$ ist der Exponent mit $\alpha = 3,9 \pm 0,8$ deutlich größer. Besonders ist er mehr als doppelt so groß wie der größte in der gängigen Theorie vorhergesagte Exponent $\alpha = 1,5$ für Peripheriediffusion. Die Graphen der für die beiden Bereiche angepassten Kurven schneiden sich ungefähr bei $A = 7nm^2$. Dies ist der in Abschnitt 7.3 bestimmte Grenzwert des Strukturübergangs der Cu-Inseln. Mit dem Strukturwechsel geht gleichzeitig eine Veränderung des elektronischen Systems der Insel einher. Der größere Anstieg der Diffusionskonstante für kleinere Inseln nach diesem Übergang könnte durch eine stärkere Bindung innerhalb und einer schwächeren Bindung der Kupferatomansammlung zum Substrat hervorgerufen werden. Hierdurch würden kollektive Bewegungen der Cu-Insel oder von Teilen der Cu-Insel begünstigt. Auffällig ist, dass aktuelle theoretische Modelle kollektive Bewegungen erst für Adatominseln aus einigen wenigen Atomen und nicht für Inseln aus einigen Dutzend Atomen sehen (siehe [Tru2001], [Sal2001] und [Kar2006]).

Die ausgewerteten Messungen sind mit dem Tunnelmikroskop bei einer Scanrate von $100nm^2/s$ bis $300nm^2/s$ aufgenommen. Um einen Einfluss des Scanvorganges auf die Inseldiffusion auszuschließen, erfolgt auch eine Messung bei einer um ungefähr den Faktor zehn größeren Scanrate von $1500nm^2/s$. Wie in Abbildung 7.10C zu sehen ist, passen die Messungen mit der hohen Scanrate (rote Dreiecke) sehr gut auf die Messungen mit der niedrigen Scanrate (schwarze Quadrate). Ein Spitzeneinfluss kann also ausgeschlossen werden. Außerdem ist die geringste Scanrate der Messung um einen Faktor 100 größer als die größte gemessene Diffusionskonstante $D_{MAX} \approx 1nm^2/s$. Messfehler durch eine im Vergleich zur Inselbewegung zu langsame Bildabtastung kommen also auch nicht vor.

7.5 Zerfall der Cu-Inseln

Die klassische Theorie zur Reifung von Adatominseln (LSW-Theorie [3]) beschreibt eine kreisförmige Insel mit Radius r, die konzentrisch von einer ebenfalls kreisförmigen Stufenkante mit Radius R umgeben ist. Wechselwirkung zwischen Insel und Stufenkante ist über das auf der Terrasse vorhandene Adatomgas möglich. Ansetzen einer stationären Diffusionsgleichung liefert eine Differentialgleichung für die zeitliche Entwicklung des Inselradius $r(t)$ (siehe [Mor1995]):

$$\frac{dr(t)^2}{dt} = -g(R, r(t)) \left(e^{\frac{\gamma}{r(t)}} - 1 \right) \tag{7.10}$$

[3] benannt nach Lifshitz, Slyozov und Wagner

Hierbei hängt $g(R,r)$ noch von der Adatomdiffusivität ab. Der Exponent γ bestimmt sich aus Stufenspannung und Umgebungstemperatur. Gleichung 7.10 ist nicht analytisch lösbar. Anwendung der Näherungen $g(R,r) \approx g = const$ und $e^{\frac{\gamma}{r}} \approx \frac{\gamma}{r} + 1$ führt auf eine einfachere Gleichung:

$$\frac{dr^2}{dt} = -\frac{g\gamma}{r} \tag{7.11}$$

Integration von Gleichung 7.11 ergibt schließlich ein Potenzgesetz für den Inselzerfall:

$$r^3 \propto (t_0 - t) := \tau \;\Leftrightarrow\; r \propto \tau^{\frac{1}{3}} \tag{7.12}$$

Die Zeit t_0 bezeichnet dabei den Zeitpunkt, an dem die Insel vollständig zerfallen ist. Das Potenzgesetz kann über die Proportionalität $A \propto r^2$ auf eine Beziehung zwischen Inselfläche A und Zerfallszeit τ umgeformt werden:

$$A \propto \tau^{2 \cdot \frac{1}{3}} \tag{7.13}$$

Die Cu-Inseln verlieren also im Laufe der Zeit ihr gesamtes Material über das Adatomgas an die umgebenden Stufenkanten. Dies gilt natürlich nur, wenn die Inseldichte auf der Oberfläche so gering ist, dass Insel-zu-Insel-Wechselwirkungen vernachlässigt werden können.

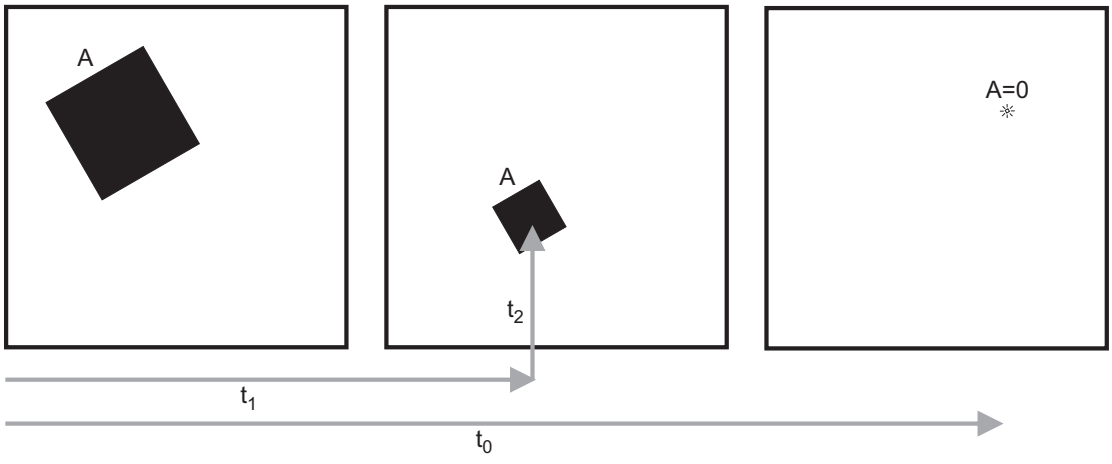


Abbildung 7.11: Zur Untersuchung des Inselzerfalls

Abbildung 7.11 zeigt das Prinzip der Auswertung der Messdaten zum Inselzerfall. Das Analyseprogramm identifiziert die einzelnen Cu-Inseln und bestimmt ihre Fläche A (siehe Abschnitt 7.1). Empirische Daten zeigen, dass dies auf ca. 1% genau geschieht. Der Flächenfehler ist also $Err(A) = A/100$. Die Zeit $t = t_1 + t_2$

zum Messwert von A setzt sich aus der bis zum aktuellen Bild vergangenen Zeit t_1 und der vom Start des aktuellen Bildes bis zum Erreichen der verfolgten Insel durch die Scanzeile in diesem Bild vergangenen Zeit t_2 zusammen. Durch dieses Verfahren wird der Zeitfehler $Err(t) \approx 0$ minimiert und gegenüber den anderen Messfehlern als verschwindend gering betrachtet. Als Zeitpunkt t_0 wird der Zeitpunkt gewählt, an dem die verfolgte Insel nicht mehr nachweisbar ist. Außerdem werden aufgrund der hohen Messwertdichte und zur Verkleinerung der Fehlerbalken jeweils zehn Messpunkte der Rohdaten über Mittelwertsbildung zusammengefasst.

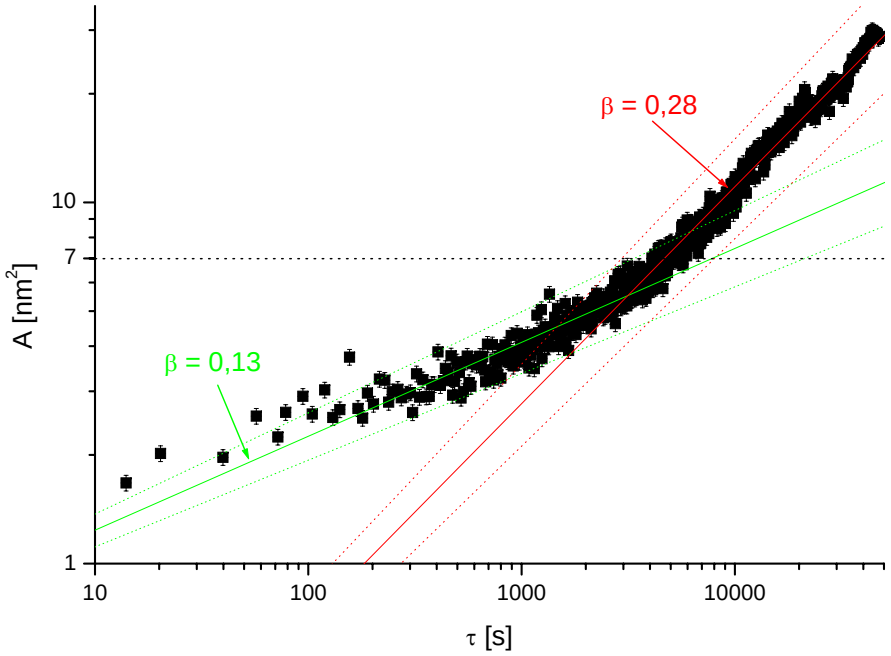


Abbildung 7.12: Inselfläche A gegen Zerfallszeit τ

In Abbildung 7.12 sind die nach der oben vorgestellten Methode ermittelten Inselflächen A in Abhängigkeit der Zerfallszeit $\tau := t_0 - t$ dargestellt. Messwerte werden in einem Zeitbereich von $10s < \tau < 50000s$ aufgenommen. Die zugehörigen Inselflächen erstrecken sich über einen Wertebereich von $2nm^2 < A < 35nm^2$. In doppeltlogarithmischer Darstellung lässt sich der Graph in zwei linear steigende Bereiche einteilen. Um das Potenzverhalten aus Gleichung 7.13 zu testen, wird die folgende Funktion durch nichtlineare Kurvenanpassung mit den Parametern β, b und c an die beiden Bereiche des Graphen angepasst:

$$A = b(\tau + c)^{2\beta} \tag{7.14}$$

Bereich von $\tau[s]$	β	$b[\frac{nm^2}{s}]$	$c[s]$
$30 - 3000$	$0,13 \pm 0,01$	$0,6 \pm 0,1$	0 ± 10
$8000 - 50000$	$0,28 \pm 0,01$	$0,10 \pm 0,05$	-1566 ± 77

Tabelle 7.3: Ergebnisse der Kurvenanpassung von Gleichung 7.14 an Graphen 7.12

Im Bereich $8000s < \tau < 50000s$ ergibt sich ein Exponent $\beta = 0,28 \pm 0,01$. Dies ist nicht ganz der erwartete Exponent $\beta = \frac{1}{3}$ aus Gleichung 7.13. Der Unterschied lässt sich auf den Fehler zurückführen, der durch die verwendeten Näherungen in diese Gleichung eingeführt wurde. Weiterhin stimmt der ermittelte Wert gut mit dem Exponenten $\beta_{Ag} = 0,27 \pm 0,06$ für Zerfall von Silberinseln auf einer Ag(111)-Oberfläche überein (siehe [Mor1995]). Der für den Bereich $30s < \tau < 3000s$ ermittelte Exponent $\beta = 0,13 \pm 0,01$ ist weniger als halb so groß. Ab der bereits erwähnten kritischen Schwelle von $A = 7nm^2$ zerfallen die Cu-Inseln also deutlich langsamer. Die vorgestellte LSW-Theorie ist nicht in der Lage diesen Zerfallsmodus zu beschreiben. Dieses Verhalten ist auch ein Indiz für eine verstärkte Bindung der Atome innerhalb einer Cu-Insel unterhalb des gefundenen Schwellenwerts.

7.6 Schlussfolgerung

Für heteroepitaktische Cu-Inseln auf einer Ag(100)-Oberfläche wird eine kritische Atomanzahl von ca. $N \approx 80$ pro Insel identifiziert. Für $N > 80$ adsorbieren die Kupferatome auf den Muldenplätzen der Silberoberfläche. Ihr Diffusions- und Zerfallsverhalten entspricht den Ergebnissen aus der Untersuchung homoepitaktischer Systeme. Für $N < 80$ adsorbieren die Kupferatome auf den Brückenplätzen der Silberoberfläche. Die scheinbare Höhenänderung der Inseln bei diesem Übergang ist der erwarteten geometrischen Höhenänderung entgegengesetzt. Dies lässt auf eine gleichzeitige Umordnung der elektronischen Struktur der Cu-Inseln schließen. Weiterhin verlangsamt sich der Inselzerfall und beschleunigt sich die Inseldiffusion in diesem Größenbereich. Eine Abschwächung der Bindung der Inseln zum Substrat und eine Verstärkung der Bindungen der Cu-Atome zueinander innerhalb der Inseln könnte eine Erklärung hierfür sein. Dies würde auch zu einer Begünstigung kollektiver Bewegungen der Inselatome führen und das starke Anwachsen der Diffusionskonstante begründen. Bemerkenswert ist, dass der beobachtete Übergang bei einer vergleichsweisen großen Atomanzahl von $N \approx 80$ auftritt. Theoretische Arbeiten legen ähnliche Prozesse erst für Anzahlen $N < 10$ nahe.

Kapitel 8

Zusammenfassung und Ausblick

Im ersten Teil dieser Arbeit (Kapitel 2 - 5) wird die Entwicklung eines Steuersystems für ein Rastertunnelmikroskop auf Basis eines Echtzeitrechners vorgestellt. Das Kontrollsystem ist kompakt, kostengünstig und lässt sich über eine Standard-Netzwerkschnittstelle fernsteuern. Seine Leistungsfähigkeit ist vergleichbar mit der kommerzieller Systeme. Die Übertragung der gesamten Steuerbefehle und Messdaten über ein Breitbandnetzwerk ist bisher einzigartig. Die Auswahl des Steuersystem für ein Projekt an Bord der internationalen Raumstation der *ESA* bestätigt dies. Außerdem wird die Kontrolleinheit bereits erfolgreich an Tunnelmikroskopen für Forschung und Lehre eingesetzt.

Einen Großteil der bisher abgeschlossenen Entwicklungsarbeit macht der Aufbau der Ein- und Ausgabemodule und die hardwarenahe Programmierung der zeitkritischen Steuer- und Regelungsaufgaben aus. Für die Fortführung des Projektes ist eine Erweiterung des Funktionsumfanges des Kontrollsystems geplant. Module zur Aufnahme von Tunnelspektren und zur Ausführung von Manipulationen auf der Nanoskala sollen hinzugefügt werden. Ein nächster Schritt wäre die Anpassung der Elektronik an die Steuerung anderer Rastersondenmikroskope.

Der zweite Teil der Arbeit (Kapitel 6 - 7) beschäftigt sich mit der Struktur und Dynamik von Kupferinseln auf einer Ag(100)-Oberfläche. Es wird für dieses System eine kritische Atomanzahl von ca. $N \approx 80$ Atomen pro Insel identifiziert. Für $N > 80$ besetzen die Kupferatome die Muldenplätze der Silberoberfläche. Ihr Diffusions- und Zerfallsverhalten entspricht den Ergebnissen aus der Untersuchung homoepitaktischer Systeme. Für $N < 80$ adsorbieren die Kupferatome auf den Brückenplätzen der Silberoberfläche. Die scheinbare Höhenänderung der Inseln bei dieser Umordnung lässt auf eine gleichzeitige Änderung der elektronischen Struktur der Cu-Inseln schließen. Der Inselzerfall verlangsamt sich und die Inseldiffusion beschleunigt sich unterhalb der kritischen Atomanzahl. Eine Abschwächung der Bindung der Inseln zum Substrat und eine Verstärkung der Bindungen der Cu-Atome zueinander innerhalb der Inseln wird vermutet. Dies würde auch zu einer Begünsti-

gung kollektiver Bewegungen der Inselatome führen und das starke Anwachsen der Diffusionskonstante begründen.

Das Auftreten kollektiver Prozesse innerhalb einer recht großen Insel aus einigen Dutzend Atomen ist in keiner gängigen Theorie vorgesehen. Es gilt zu klären, ob es sich hierbei um einen systemspezifischen Effekt von Kupfer auf Ag(100) handelt. Diffusions- oder Zerfallsmessungen an homoepitaktischen Inseln gleicher Größe liegen nicht vor. Diese Vergleichmessungen sollen möglichst bald durchgeführt werden. Auch wäre eine eingehende theoretische Untersuchung mit Simulationsrechnungen auf Basis der gefundenen experimentellen Ergebnisse wünschenswert. Weitere Experimente mit dem Rastertunnelmikroskop könnten eine Temperaturabhängigkeit des Systems analysieren.

Literaturverzeichnis

[Bar1961] J. Bardeen
Tunneling from a many-particle point of view
In: Phys. Rev. Let., Band 6, Seiten 57-59
APS, 1961

[Bar1997] C. Barchesi, A. Cricenti, R. Generosi, C. Giammichele, M. Luce, M. Rinaldi
A flexible implementation of scanning probe microscopy utilizing a multifunction system linked to a PC-Pentium controller
In: Rev. Sci. Instrum., Band 68, Seiten 3799-3802
AIOP, 1997

[Bec1998] W. Becker, K. Bonfig, K. Höing
Handbuch elektrische Messtechnik
Hüthig, 1. Auflage, Heidelberg, 1998

[Bin1982] G. Binnig, H. Rohrer, C. Gerber, E. Weibel
Surface Studies by scanning tunneling microscope
In: Phys. Rev. Let., Band 49, Seiten 57-61
APS, 1982

[Bin1983] G. Binnig, H. Rohrer, C. Gerber, E. Weibel
7x7 reconstruction on Si(111) resolved in real space
In: Phys. Rev. Let., Band 50, Seiten 120-123
APS, 1983

[Das2003] A. Dashchenko
Manufacturing Technologies for Machines of the Future
Springer, 1. Auflage, Heidelberg, 2003

[Die1998] M. Dietterle, T. Will, D. Kolb
The initial stages of Cu electrodeposition on Ag(100): an in situ STM study
In: Surface Science, Band 396, Seiten 189-197
Elsevier, 1998

[Dro2004] T. Drobek, M. Reiter, W. Heckl
Scanning probe microscopy experiments in microgravity
In: App. Surf. Sci., Band 238, Seiten 3-8
Elsevier, 2004

[Ein1905] A. Einstein
Über die von der molekularkinetischen Theorie der Wärme geforderte Bewegung von in ruhenden Flüssigkeiten suspendierten Teilchen
In: Annalen der Physik, Band 17, Seiten 549-560
Johann Ambrosius Barth Verlag, 1905

[Ger1986] C. Gerber, G. Binnig, H. Fuchs, O. Marti, H. Rohrer
Scanning tunneling microscope combined with a scanning electron microscope
In: Rev. Sci. Instrum., Band 57, Seiten 221-224
AIOP, 1986

[Hei1999] J. Heinonen, I. Koponen, J. Merikoski, T. Ala-Nissila
Island Diffusion on metal fcc(100) surfaces
In: Phys. Rev. Let., Band 82, Seiten 2733-2737
APS, 1999

[Hor2007] I. Horcas, R. Fernández, J. Gómez-Rodríguez, J. Colchero, J. Gómez-Herrero, A. Baro
WSXM: A software for scanning probe microscopy and a tool for nanotechnology
In: Rev. Sci. Instrum., Band 78, Seiten 013705/1-013705/8
AIOP, 2007

[Hum2000] M. Humphry, R. Chettle, P. Moriarty, M. Upward, P. Betona
Digital scanning probe microscope controller for molecular manipulation applications
In: Rev. Sci. Instrum., Band 71, Seiten 1698-1701
AIOP, 2000

[Jah2005] M. Jahma, M. Rusanen, A. Karim, I. Koponen, T. Ala-Nissila, T. Rahman
Diffusion and submonolayer island growth during hyperthermal deposition on Cu(100) and Cu(111)
In: Surface Science, Band 598, Seiten 246-252
Elsevier, 2005

[Kar2006] A. Karim, A. Al-Rawi, A. Kara, T. Rahman
Diffusion of small two-dimensional Cu islands on Cu(111) studied with a kinetic Monte Carlo method

In: Phys. Rev. B, Band 73, Seiten 165411/1-165411/11
APS, 2006

[Kha1996] S. Khare, T. Einstein
Brownian motion and shape fluctuations of single-layer adatom and vacancy clusters on surfaces: Theory and simulations
In: Phys. Rev. B, Band 54, Seiten 11752-11761
APS, 1996

[Kta2003] M. Reiter, A. v. Richter
SONOS - Conceptual Design
Projektbericht SPM-KT-TN-E-001
Kayser-Threde GmbH, München, 2003

[Ktb2003] M. Reiter, A. v. Richter, G. Bacabac, D. Blottner, S. Fiedler, F. Francini, W. Heckl, E. Jessberger, H. Kolb, R. Lindner, W. Luther, A. Mikhailov, M. Monici, G. Sonnenfeld, R. Toffanin, U. Walter, M. Wiedemann
SONOS - Scientific purposes and future outlook
Projektbericht SPM-KT-TN-E-004
Kayser-Threde GmbH, München, 2003

[Lac2005] M. Lackinger, S. Griessl, W. Heckl, M. Hietschold, G. Flynn
Self-Assembly of Trimesic Acid at the Liquid-Solid Interface - a Study of Solvent-Induced Polymorphism
In: Langmuir, Band 21, Seiten 4984-4988
ACS, 2005

[Lae2001] E. Laegsgaard, L. Österlund, P. Thostrup, P. Rasmussen, I. Stensgaard, F. Besenbacher
A high-pressure scanning tunneling microscope
In: Rev. Sci. Instrum., Band 72, Seiten 3537-3542
AIOP, 2001

[Mor1995] K. Morgenstern, G. Rosenfeld, G. Comsa
Decay of Two-Dimensional Ag Islands on Ag(111)
In: Phys. Rev. Let., Band 76, Seiten 2113-2116
APS, 1995

[Mor1996] K. Morgenstern, G. Rosenfeld, B. Poelsema, G. Comsa
STM-imaging of nanostructure dynamics on Ag(111) - experimental challenges and solutions
In: Surface Science, Band 352, Seiten 956-959
Elsevier, 1996

[Mun1998] R. Munoza, P. Villagrac, G. Kremer, L. Moraga, G. Vidal
Control circuit for a scanning tunneling microscope

In: Rev. Sci. Instrum., Band 69, Seiten 3259-3267
AIOP, 1998

[Mus1982] R. Musket, W. McLean, C. Colmenares, D. Makowiecki, W. Siekhaus
Preparation of atomically clean surfaces of selected elements: a review
In: Applications of Surf. Sci., Band 10, Seiten 143-207
North-Holland Publishing Company, 1982

[Pai1997] W. Pai, A. Swan, Z. Zhang, J. Wendelken
Island Diffusion and Coarsening on Metal (100) Surfaces
In: Phys. Rev. Let., Band 79, Seiten 3210-3213
APS, 1997

[Pan2004] O. Panzer, H. Fuchs
Ein Rastertunnelmikroskop im Selbstbau
In: Physik in unserer Zeit, Band 35, Seiten 217-217
Wiley-VCH, 2004

[Pet2001] L. Petersen, M. Schunack, B. Schaefer, T. Linderoth, P. Rasmussen, P. Sprunger, E. Laegsgaard, I. Stensgaard, F. Besenbacher
A fast-scanning, low- and variable-temperature scanning tunneling microscope
In: Rev. Sci. Instrum., Band 72, Seiten 1438-1444
AIOP, 2001

[Pin1989] R. Piner, R. Reifenberger
Computer control of the tunnel barrier width for the scanning tunneling microscope
In: Rev. Sci. Instrum., Band 60, Seiten 3123-3127
AIOP, 1989

[Ran2000] R. Randler, D. Kolb, B. Ocko, I. Robinson
Electrochemical copper deposition on Au(100): a combined in situ STM and in situ surface X-ray diffraction study
In: Surface Science, Band 447, Seiten 187-200
Elsevier, 2000

[Rob1963] R. Roberts
Generation of clean surfaces in high vaccum
In: British Journal of App. Phys., Band 14, Seiten 537-538
IOP, 1963

[Roh1982] G. Binnig, H. Rohrer, C. Gerber, E. Weibel
Tunneling through a controllable vacuum gap
In: Appl. Phys. Lett., Band 40, Seiten 178-180
AIOP, 1982

[Ros2005] M. Rost, L. Crama, P. Schakel, E. van Tol, G. van Velzen-Williams, C. Overgauw, H. ter Horst, H. Dekker, B. Okhuijsen, M. Seynen, A. Vijftigschild, P. Han, A. Katan, K. Schoots, R. Schumm, W. van Loo, T. Oosterkamp, J. Frenken
Scanning probe microscopes go video rate and beyond
In: Rev. Sci. Instrum., Band 76, Seiten 053710-1 - 053710-9
AIOP, 2005

[Sal2001] P. Salo, J. Hirvonen, I. Koponen, O. Trushin, J. Heinonen, T. Ala-Nissila
Role of concerted atomic movements on the diffusion of small islands on fcc(100) metal surfaces
In: Phys. Rev. B, Band 64, Seiten 161405/1-161405/4
APS, 2001

[Sha1949] C. Shannon
Communication in the presence of noise
In: Proc. IRE, Band 37, Seiten 10-21
IRE, 1949

[Smo1906] M. von Smoluchowski
Zur kinetischen Theorie der Brownschen Molekularbewegung und der Suspension
In: Annalen der Physik, Band 21, Seiten 756-780
Johann Ambrosius Barth Verlag, 1906

[Ter1983] J. Tersoff, D. Hamann
Theory and Application for the Scanning Tunneling Microscope
In: Phys. Rev. Let., Band 50, Seiten 1998-2001
APS, 1983

[Ter1985] J. Tersoff, D. Hamann
Theory of the scanning tunneling microscope
In: Phys. Rev. B, Band 31, Seiten 805-813
APS, 1985

[Tie1986] U. Tietze, C. Schenk
Halbleiterschaltungstechnik
Springer, 8. Auflage, Heidelberg, 1986

[Tru2001] O. Trushin, P. Salo, M. Alatalo, T. Ala-Nissila
Atomic mechanisms of cluster diffusion on metal fcc(100) surfaces
In: Surface Science, Band 482, Seiten 365-369
Elsevier, 2001

[Vot1986] A. Voter
Classically exact overlayer dynamics: Diffusion of rhodium clusters on

Rh(100)
In: Phys. Rev. B, Band 34, Seiten 6819-6829
APS, 1986

[Wal1991] S. Wall, K. Ledbetter
Design of Mission Operations Systems for Scientific Remote Sensing
Taylor and Francis, 1. Auflage, London, 1991

[Won1993] T. Wong, M. Welland
A digital control system for scanning tunnelling microscopy and atomic force microscopy
In: Meas. Sci. Technol., Band 4, Seiten 270-280
IOP, 1993

[Zah2003] P. Zahl, M. Bierkandt, S. Schröder, A. Klust
The flexible and modern open source scanning probe microscopy software package GXSM
In: Rev. Sci. Instrum., Band 74, Seiten 1222-1227
AIOP, 2003

[Zau2006] C. Zaum
Rastertunnelmikroskop im Eigenbau - Ein technisches Abenteuer
In: Mikrokosmos, Band 96(6), Seiten 354-360
Elsevier, 2006

Anhang A

Leistungsdaten der Echtzeitsteuerung

Die allgemeinen Daten der Kontrolleinheit sind in Tabelle A.1 zu finden.

Formfaktor	**Abmessungen**	**Gewicht**	**Leistungsaufnahme**
$19''$	$45cm$ x $40cm$ x $14cm$	$10kg$	$21W$

Tabelle A.1: Allgemeine Daten der Kontrolleinheit

Tabelle A.2 fasst noch einmal die Leistungsdaten der Kontrolleinheit zusammen. Für die Längenangaben liegt eine typische Piezokonstante von $d_{x,y,z} = 4\frac{nm}{V}$ zugrunde. Die Stromangaben beziehen sich auf einen Tunnelstromverstärker mit einem Verstärkungsfaktor von 10^9, also einem Umrechnungsfaktor von $d_I = 1\frac{nA}{V}$.

Signal	**U**	**Rauschpegel**	**Auflösung**	**Freq.**	**Drift**
X,Y,Z	$\pm 100V$	$1,2mV/4,8pm$	$3mV/12pm$	$10kHz$	$10,4\frac{mV}{h}/41,6\frac{pm}{h}$
	$\pm 10V$	$0,6mV/2,4pm$	$300\mu V/1,2pm$	$40kHz$	$7,5\frac{mV}{h}/30\frac{pm}{h}$
	$\pm 1V$	$0,5mV/2,0pm$	$30\mu V/0,12pm$	$60kHz$	$4,3\frac{mV}{h}/17,2\frac{pm}{h}$
R1,R2	$\pm 100V$	$1,2mV$	$3mV$	$10kHz$	$10,4\frac{mV}{h}$
U_T	$\pm 10V$	$0,5mV$	$300\mu V$	$100kHz$	$30\frac{\mu V}{h}$
I_T	$\pm 10V$	$0,5mV/0,5pA$	$300\mu V/0,3pA$	$100kHz$	-
Ext	$\pm 10V$	$0,5mV$	$300\mu V$	$100kHz$	-
$5V$	$\pm 5V$	$0,3mV$	-	-	-
$12V$	$\pm 12V$	$0,6mV$	-	-	-

Tabelle A.2: Leistungsdaten der Kontrolleinheit

Anhang B

Filme von Cu auf Ag(100)

Tabelle B.1 zeigt die Daten der STM-Filme, die den Messung der Dynamik von Cu auf Ag(100) zugrunde liegen. Am Ende dieser Arbeit befindet sich eine Daten-CD mit diesen Filmen im *AVI*-Format.

Nr.	**Scan**				**Zeit**		**Cu-Beschichtung**		
	Bereich $[nm]$	Rate $[\frac{nm^2}{s}]$	I_T $[nA]$	U_T $[V]$	t $[h]$	Bilder	Bedeckung $[Ml]$	Rate $[\frac{Ml}{min}]$	T $[K]$
01	100x100	244	0,48	0,21	3,1	275	0,004	0,001	298
02	100x100	175	0,41	0,57	3,3	211	0,004	0,001	298
03	70x70	169	0,89	0,86	2,3	289	0,006	0,001	298
04	70x70	83	0,79	0,61	29,2	1771	0,128	0,009	298
05	100x100	312	0,52	0,69	1,4	161	0,005	0,001	298
06	100x100	500	0,56	0,69	1,5	269	0,003	0,001	298
07	100x100	303	0,47	0,69	2,1	219	0,003	0,001	298
08	300x300	1475	0,80	0,83	2,6	151	0,009	0,001	299

Tabelle B.1: Daten der Filme von Cu auf Ag(100)