

Posterpräsentation A

PA 43



AT9800053

Vergleich atomar aufgelöster STM-Messungen mit *ab initio* Simulationen*

G. RITZ, W.J.A. HOFER, A. BIEDERMANN, O. GENSER, M. SCHMID, P. VARGA
Institut für Allgemeine Physik, TU Wien, Wiedner Hauptstraße 8-10, 1040 Wien

Trotz einer Vielzahl experimenteller und theoretischer Arbeiten ist der Mechanismus der atomaren Auflösung der Rastertunnelmikroskopie (STM) auf Metalloberflächen nicht vollständig geklärt. Nach der Theorie von Tersoff und Hamann [1] bildet das STM die lokale Zustandsdichte im Bereich um die Fermikante ab. Wir haben deshalb FLAPW (Full potential Linearized Augmented Plane Waves) Simulationsrechnungen durchgeführt und die daraus berechnete Korrugation (Welligkeit) mit den STM-Ergebnissen verglichen. Weiters kann die Wechselwirkung der Spitze mit Oberflächenzuständen die Korrugation beeinflussen. Dies kann z.B. dazu führen, daß mit dem STM nicht die Atompositionen hell abgebildet werden, sondern die Positionen dazwischen (inverse Korrugation).

[1] J. Tersoff, D.R. Hamann, Phys. Rev. B **31**, 805 (1985)

*Arbeit unterstützt vom Fonds zur Förderung der wissenschaftl. Forschung (S6201,S6204)

PA 44



AT9800054

Chemisch aufgelöste atomare Abbildung von Legierungsoberflächen mit dem Rastertunnelmikroskop

W.HEBENSTREIT, G.RITZ, M.SCHMID und P.VARGA

Institut für Allgemeine Physik, T.U.Wien, Wiedner Hauptstr.8-10, 1040 Wien

Mit Hilfe des Rastertunnelmikroskops (STM) ist es gelungen, Legierungsoberflächen nicht nur mit atomarer Auflösung abzubilden, sondern auch gleichzeitig mit chemischer Auflösung, d.h. im STM Bild tritt ein scheinbarer Größenunterschied zwischen unterschiedlichen Elementen auf, der aber nur mit der unterschiedlichen elektronischer Struktur erklärbar ist. Bisher konnten wir diese Auflösung auf Pt X- Legierungen (X= Ni, Co, Rh, Cu) mit unterschiedlicher Zusammensetzung und unterschiedlicher kristallographischer Orientierung erhalten. War bei PtNi noch eine instabile Adsorbatspitze notwendig um chemische Auflösung zu erzielen, war bei Rh und Co mit jeder Spitze dieser Effekt beobachtbar. Durch Vergleich mit *ab initio* Rechnungen der elektronischen Struktur soll ein mögliche Erklärung für das Zustandekommen des chemischen Kontrastes gegeben werden.

Arbeit unterstützt vom Fonds zur Förderung der wissenschaftlichen Forschung (S6204)