Prof. Dr. W. Wulfhekel, Dr. L. Gerhard



## 12. Bestimmung der elektronischen Struktur anhand der Coulomb-Diamanten

Die elektronische Struktur einer Kohlenstoffnanoröhre (CNT) soll durch die Auswertung der Coulomb-Diamanten bestimmt werden. Die elektronische Struktur der CNT wird beschrieben durch zwei Bänder mit äquidistanten Zuständen, die um eine Energie  $\delta$  gegeneinander verschoben sind. Der Abstand zwischen den Zuständen eines Bands sei  $\Delta$  (siehe Abb. a), die Austauschenergie sei J (siehe Abb. c), die Aufladungsenergie  $E_C = \frac{e^2}{2C}$ . Die Excess-Coulombenergie dU berücksichtigt die zusätzliche Coulombenergie, wenn zwei Elektronen (mit unterschiedlichem Spin) den selben Zustand besetzen. Die Additionsenergie ist definiert als die Änderung des chemischen Potentials  $\mu_N$ , bei Änderung der Ladung der CNT von N zu N+1.

• Zeigen Sie, dass für die Additionsenergien gilt:

$$\Delta\mu_1 = \Delta\mu_3 = E_C + dU + J$$
 
$$\Delta\mu_2 = E_C + \delta - dU$$
 
$$\Delta\mu_4 = E_C + \Delta - \delta - dU$$

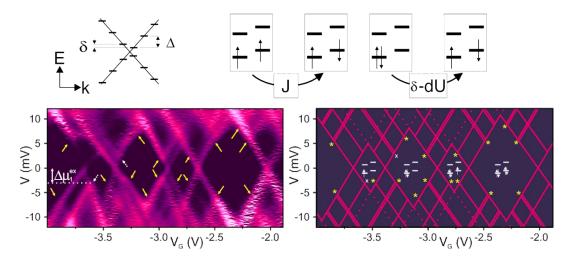
Zusätzliche Informationen erhält man durch die Auswertung der zusätzlichen parallelen Linien, die durch Anregung eines Elektrons bei Besetzung durch ein oder zwei Elektronen entstehen:

$$\Delta \mu_1^{ex} = \delta$$
 
$$\Delta \mu_1^{ex} = \delta - J - dU$$

ullet Bestimmen Sie mithilfe dieser fünf Gleichungen die fünf Parameter für die unten gezeigten Coulombdiamanten mit vier Elektronen. Links ist die differentielle Leitfähigkeit geplottet, rechts die theoretische Simulation. Vergleichen Sie  $\Delta$  mit dem theoretischen Wert für den Abstand zwischen den quantenmechanisch möglichen Zuständen

$$\Delta_{theo} = h\nu_F/2L^3$$
,

wobei  $L = 180 \, nm \text{ und } \nu_F = 8.1 \times 10^5 \, m/s.$ 

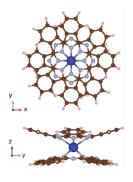


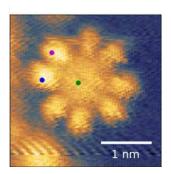


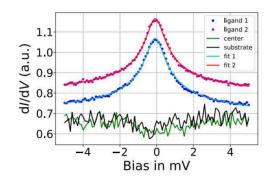
## 13. Kondoeffekt im RTM

Auf einem Phthalocyanin-Doppeldecker-Molekül mit zentralem Dysprosium-Atom wird die differentielle Leitfähigkeit in der Nähe der Fermikante gemessen.

- Für welchen Teil des Moleküls würden Sie einen Kondoeffekt erwarten? Was zeigt die Messung?
- Wie könnte man ausschließen, dass die Erhöhung der Zustandsdichte auf eine inelastische Anregung (z. B. Phononen) zurückzuführen ist?
- Was würden Sie erwarten, wenn Sie den Einfluss des Spins des Dysprosium-Atoms berücksichtigen?







## 14. Inelastische Tunnelspektroskopie

- Ein Quantenoszillator (z.B. ein Molekül) mit der Eigenfrequenz  $\omega_0 = 7,5 \times 10^{12} s^{-1}$  befindet sich auf einer metallischen Oberfläche. Ein Tunnelspektrum wird mit der RTM-Spitze direkt über dem Molekül gemessen. Wie sehen der Tunnelstrom und seine erste Ableitung im Bereich -100 mV bis 100 mV aus? Wie sieht das  $d^2I/dU^2$ -Spektrum in diesem Bereich aus? Nehmen Sie an, dass die Zustandsdichten von Spitze und Probe in diesem Bereich konstant sind.
- Wenn der Tunnelwiderstand  $2\,M\Omega$  beträgt, und die Anregungswahrscheinlichkeit durchschnittlich  $10\,\%$  beträgt, wie groß ist das  $d^2I/dU^2$ -Signal bei Raumtemperatur? Bei welcher Temperatur sollte die Messung gemacht werden, um eine minimale Peakhöhe von  $1\,\mu A \cdot V^{-2}$  zu erreichen? Nehmen Sie an, dass die intrisische Breite der Anregung unendlich klein ist und eine Modulationsamplitude von  $10\,\text{mV}$  benutzt wird.
- Die Amplitude des inelastischen Peaks wächst quadratisch mit der Modulationsamplitude. Warum kann man keine beliebig große Modulationsamplitude benutzen? Was ist die maximale sinnvolle Modulationsamplitude bei diesem Experiment? Wie würde das  $d^2I/dU^2$ -Spektrum mit 0,5 eV Modulation aussehen?