

Ingo Wirth: Untersuchung des Einflusses unterschiedlicher Dotierungen auf die elektronische Struktur von deponierten Einzelfullerenen mittels Rastertunnelspektroskopie. 2001

An diversen Fullerenen (C_{60} , $Ce@C_{60}$, $Ce@C_{50}$, $Ce@C_{44}$, $Ce@C_{36}$, $La@C_{44}$, $La@C_{60}$, $Y@C_{60}$ und $C_{59}N$) wurden im Rahmen dieser Arbeit mit dem Rastertunnelmikroskop topographische und spektroskopische Messungen durchgeführt.

C_{60} und die endohedral dotierten Fullerene wurden in einer Laserverdampfungsquelle erzeugt, massenselektiert und auf hochorientiertem pyrolytischen Graphit deponiert. $(C_{59}N)_2$ -Pulver wurde in situ aufgedamft.

Nach der Lokalisierung der deponierten Einzelfullerene auf der Substratoberfläche anhand der topographischen Messungen, wurden am Ort der Fullerene spektroskopische Messungen durchgeführt. Diese spektroskopischen Untersuchungen ergaben eine deutliche Änderung der elektronischen Struktur in Abhängigkeit von der Dotierung und der geometrischen Struktur der Fullerene. Speziell zeigte sich, daß die endohedral dotierten Fullerene generell wesentlich kleinere Energielücken besitzen als das reine C_{60} . So sind alle untersuchten Cer dotierten Fullerene halbleitend, wobei tendentiell eine Verkleinerung der Energielücke mit wachsender Käfiggröße zu verzeichnen war. $La@C_{60}$ und $Y@C_{60}$ besitzen überhaupt keine Energielücke und sind damit metallisch.

Insgesamt zeigte sich, daß die Wechselwirkung der endohedralen Fullerene mit dem Substrat nur sehr gering ist. Der Einfluß dieser Wechselwirkung auf die elektronische Struktur ist damit im Gegensatz zum Einfluß der Dotierung vernachlässigbar klein.

Das Heterofulleren $C_{59}N$ besitzt im Verhältnis zu den endohedralen Fullerenen eine große Energielücke, die jedoch etwas kleiner ist, als die des undotierten C_{60} . Außerdem wurde eine relativ starke Wechselwirkung des Heterofullerens mit dem Graphit-Substrat nachgewiesen.

In this PhD thesis the scanning tunneling microscope is used to perform topographic and spectroscopic investigations on various fullerenes (C_{60} , $Ce@C_{60}$, $Ce@C_{50}$, $Ce@C_{44}$, $Ce@C_{36}$, $La@C_{40}$, $La@C_{60}$, $Y@C_{60}$, and $C_{59}N$).

C_{60} and the endohedral doped fullerenes have been produced in a laser vaporization source and have been mass-selected prior to soft-landing onto a highly oriented pyrolytic graphite. $(C_{59}N)_2$ -powder has been evaporated in situ.

After localising the deposited fullerenes onto the substrate surface using topographic measurements, spectroscopic investigations has been performed locally on the individual fullerenes. The results of these investigations demonstrated a dramatic change of the electronic structure depending on the doping and geometric structure of the fullerenes. Specifically the gap of all the endohedral doped fullerenes is smaller than the gap of pure C_{60} . In detail, all cerium-doped fullerenes possess semiconducting properties with an increasing gap for decreasing cage size. No gap has been detected for $La@C_{60}$ und $Y@C_{60}$. Thus, these fullerenes exhibit metallic behaviour.

For endohedral doped fullerenes there is only a weak interaction with the substrate. The interaction effect on the electronic structure is negligible in comparision with the effect of endohedral doping. The gap of the heterofullerene $C_{59}N$ is large in comparison with the gap of the endohedral doped fullerenes but less than the gap of pure C_{60} . Furthermore, there is a strong interaction between the heterofullerene and the graphite substrate.