

Inhalt

Vorwort — V

Inhaltsübersicht — IX

Vorwort zu Band 3/2 — XI

21 Standardkonzepte der Theoriebildung — 1

- 21.1 Allgemeine Rahmenbedingungen — 2
- 21.2 Konvergenz experimenteller und theoretischer Verfahren — 6
- 21.3 Nanostrukturen und ihre Dynamik — 8
 - 21.3.1 Nanoskalige Bausteine und funktionale Einheiten — 9
 - 21.3.2 Komplexe Nanostrukturen und Grenzflächen — 13
 - 21.3.3 Dynamik von Nanostrukturen — 14
- 21.4 Strategien bei der Simulation von Nanostrukturen — 15
 - 21.4.1 Skalenübergreifende Ansätze — 15
 - 21.4.2 Bedeutung effizienter Algorithmen — 17
 - 21.4.3 Präzision und Ausmaß der Vorhersagbarkeit von Eigenschaften — 19
- 21.5 Beispiele mit Querschnittsbedeutung — 21
 - 21.5.1 Allgemeines — 21
 - 21.5.2 Tight Binding-Ansatz — 22
 - 21.5.3 Dichtefunktionaltheorie — 26
 - 21.5.4 Monte Carlo-Methoden — 34
 - 21.5.5 Molekulardynamiksimulationen — 42
- Literaturverzeichnis — 50

22 Rastersondenverfahren — 55

- 22.1 Grundlagen — 55
- 22.2 Rastertunnelmikroskopie — 58
 - 22.2.1 Entwicklung der Tunnelmikroskopie — 58
 - 22.2.2 Grundlagen der Rastertunnelmikroskopie — 59
 - 22.2.3 Hochaufgelöste STM-Abbildungen — 70
 - 22.2.4 Rastertunnelspektroskopie — 81
 - 22.2.5 Nanoskalige Variationen der Zustandsdichte — 88
 - 22.2.6 Spinpolarisiertes Tunneln — 100
 - 22.2.7 Atomare Manipulationen — 118
 - 22.2.8 Weitere STM-Betriebsmodi — 131
- 22.3 Rasterkraftmikroskopie — 138
 - 22.3.1 Aufbau und Betriebsmodi von Kraftmikroskopen — 138
 - 22.3.2 Kräfte — 152

22.3.3	Höchstauflösung —	172
22.3.4	Molekulare Erkennung —	178
22.3.5	Magnetische Austauschkraftmikroskopie und spinabhängige Reibung —	182
22.3.6	Elektrische und Kelvin-Sonden-Rasterkraftmikroskopie —	187
22.3.7	Magnetische Rasterkraftmikroskopie —	193
22.3.8	Magnetresonanzkraftmikroskopie —	201
22.3.9	Atomare und Oberflächenmanipulationen —	210
22.4	Optische Rasternahfeldmikroskopie —	219
22.4.1	Grundlagen —	219
22.4.2	Theoretische Grundlagen —	222
22.4.3	SNOM-Sonden —	230
22.4.4	Anwendungen —	233
22.5	Weitere Rastersondenverfahren —	243
22.5.1	Generelles —	243
22.5.2	Rasterthermomikroskopie —	244
22.5.3	Ionenleitfähigkeitsmikroskopie —	246
22.5.4	Raster-SQUID-Mikroskopie —	251
22.5.5	Mikroskopie mit NV-Zentren —	254
	Literaturverzeichnis —	269

Stichwortverzeichnis —	291
-------------------------------	------------