

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

**Stichwortverzeichnis — 291**