

Le microscope à effet tunnel

L'objet de cette analyse documentaire est de présenter le microscope à effet tunnel du point de vue de son principe expérimental (section 1) et du point de vue théorique (section 2).

1 Principe du microscope à effet tunnel

1.1 Principe général

Extrait de la documentation en ligne disponible sur le site du Commissariat à l'Énergie Atomique (CEA) [1] :

« La microscopie à effet tunnel (Scanning Tunneling Microscopy ou STM en anglais) est une technique développée dans les laboratoires d'IBM à Zurich par Gerd Binnig et Heinrich Rohrer [2] (Prix Nobel de Physique en 1986). Cette technique est basée sur un phénomène physique connu depuis les origines de la mécanique quantique, l'effet tunnel [3, 4]. Un microscope à effet tunnel est constitué de deux électrodes dont l'une a la forme d'une pointe et l'autre est la surface du film à étudier (voir figure 1). La distance pointe-échantillon est de l'ordre de quelques dixièmes de nanomètre. Si une tension de polarisation est appliquée entre la pointe et la surface, les électrons ont une probabilité non nulle de passer d'une électrode à l'autre et un courant tunnel va donc naître.

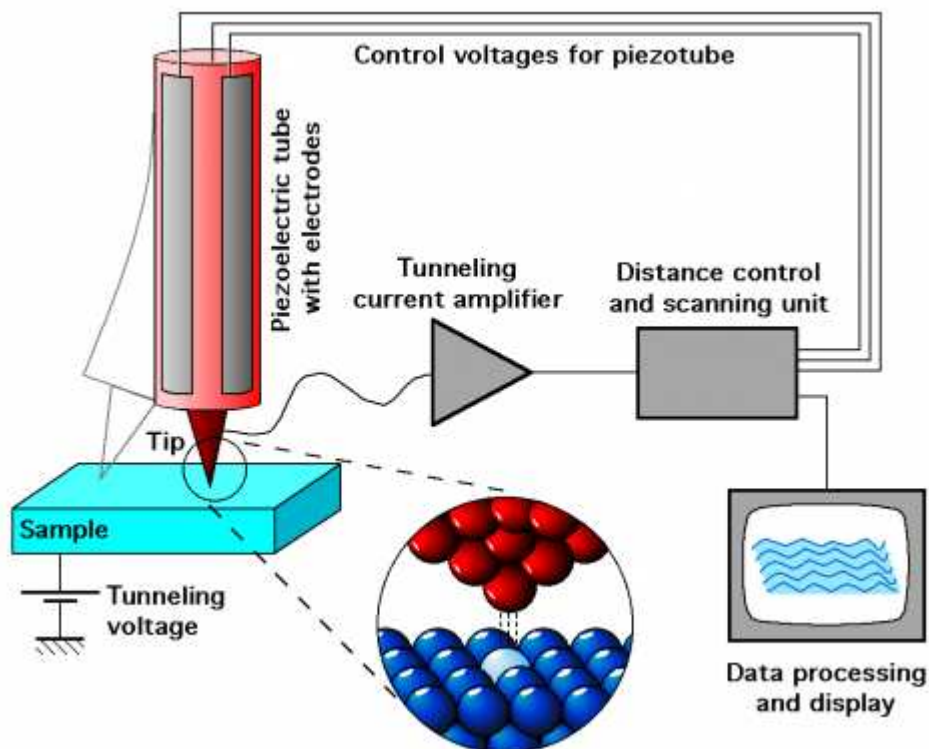


FIGURE 1 – Schéma de principe d'un STM permettant l'enregistrement de la topographie de la surface d'un échantillon (balayage de la pointe dans le plan de l'échantillon et déflexion selon la verticale commandée par le signal d'asservissement) [6].

Le principe de l'expérience consiste à déplacer la pointe (voir figure 1) au-dessus de la surface du film (à l'aide de céramiques piézo-électriques) en maintenant le courant tunnel constant par un dispositif d'asservissement. Ainsi la distance pointe-échantillon reste constante et l'enregistrement des déplacements verticaux de la pointe reproduit fidèlement la topographie de la surface. Si la pointe est suffisamment fine (micro-pointe de quelques dixièmes de nanomètres), le relief observé peut avoir la résolution atomique. »

1.2 La première réalisation expérimentale

Dans leur expérience historique, dont les résultats furent publiés en 1982 [2], Binnig *et al.* ont étudié le courant tunnel s'établissant entre une électrode de platine et une électrode de tungstène dans un vide poussé de l'ordre de 10^{-9} bar. Les électrodes sont soumises à une différence de potentiel de 60 mV. La figure 2 représente le schéma de l'expérience. La figure 3 montre la dépendance expérimentale, à différence de potentiel fixée, du courant tunnel en fonction de la distance séparant les deux électrodes (de l'ordre de quelques 0,1 nm à comparer à la distance typique d'amortissement tunnel de l'ordre de 0,09 nm, voir section 1). Les résultats montrent une dépendance exponentielle du courant avec la distance séparant les électrodes comme le prévoit la théorie (formule 13).

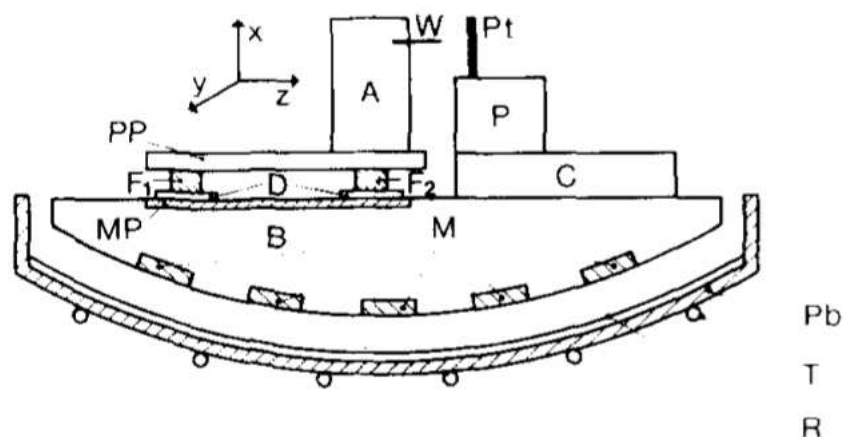


FIGURE 2 – Schéma de l'expérience et du système de lévitation magnétique servant à éviter toute perturbation mécanique. On y voit notamment les électrodes de platine (Pt) et de tungstène (W) entre lesquels le courant tunnel a été mesuré. [2].

1.3 Et aujourd'hui ... ?

Nous allons ici présenter quelques images spectaculaires obtenues à l'aide d'un microscope à effet tunnel.

Sur la figure 4 est représentée une image obtenue à l'aide d'un microscope à effet tunnel sur une surface de plomb. Les points jaunes (brillants) correspondent à des maxima de densité électronique révélant la présence des atomes de plomb [10].

Sur la figure 5, on peut observer la présence de 48 atomes de fer disposés en cercle. On observe également des ondulations circulaires à l'intérieur du cercle constitué par les atomes de fer, ces ondulations correspondent à la densité électronique des électrons des atomes de fer, les

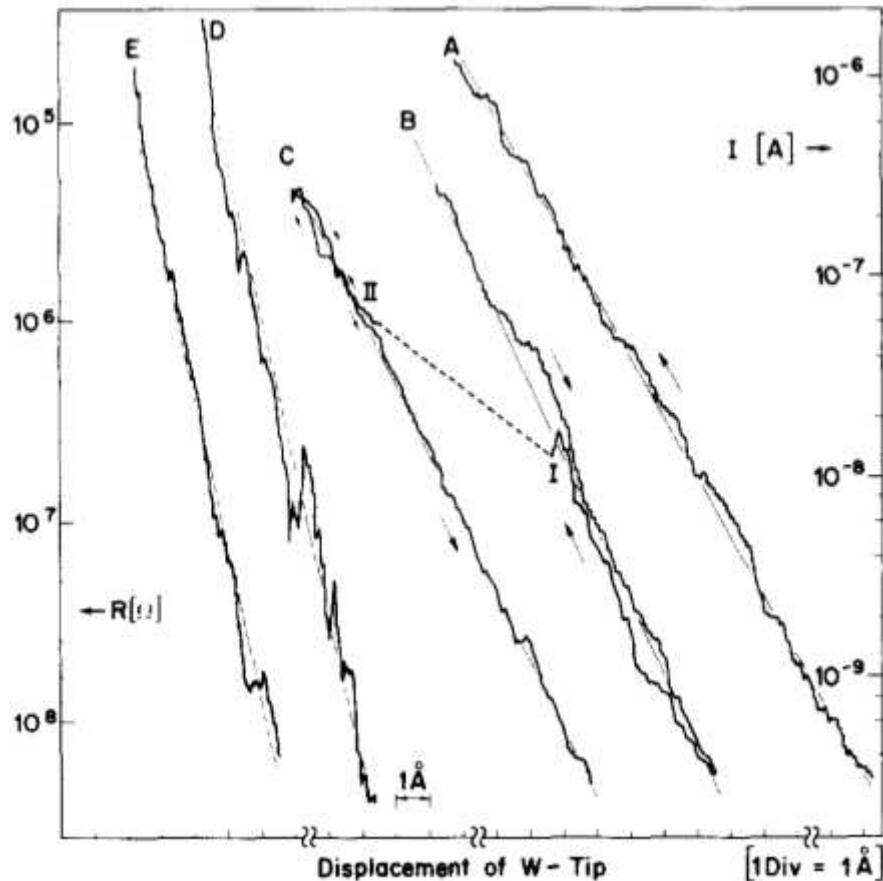


FIGURE 3 – Résistance tunnel et courant tunnel en fonction du déplacement de l'électrode de platine pour différents états de surface des électrodes. L'origine du déplacement est arbitraire pour toutes les courbes excepté pour les courbes B et C de même origine. Le déplacement de l'électrode est réalisé à une vitesse de $0,1 \text{ nm.s}^{-1}$. Le travail de sortie calculé à partir de ces courbes (voir formule 13) donne $W \simeq 0,7 \text{ eV}$ pour les courbes A, B et C et $W \simeq 3,2 \text{ eV}$ pour les courbes D et E. La faible valeur pour les courbes A, B et C s'explique par des états de surface non propres et un vide insuffisamment poussé, ce qui a été rétabli pour les courbes D et E donnant une valeur plus conforme à la valeur attendue de 5 eV [2].

auteurs [11] ont pu prédire la forme de ces ondulations en résolvant l'équation de Schrödinger dans un puits d'énergie potentielle plat cylindrique.

2 Un peu de théorie

Dans le dispositif de microscopie à effet tunnel, deux métaux sont séparés par une distance d de vide. Pour simplifier, l'étude qui suit, nous considérerons le problème comme unidimensionnel d'axe x .

2.1 Une première approche à différence de potentiel nulle

Dans cette section nous allons étudier le cas où la différence de potentiel entre les deux électrodes est nulle. En première approximation, on peut alors décrire le système par une marche

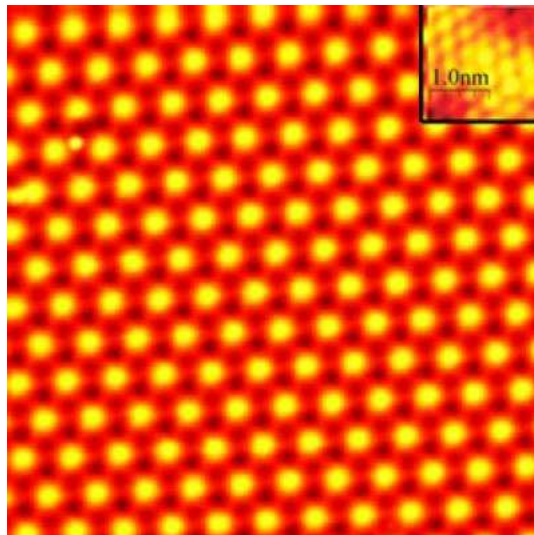


FIGURE 4 – Surface de plomb étudiée par microscopie à effet tunnel [10].

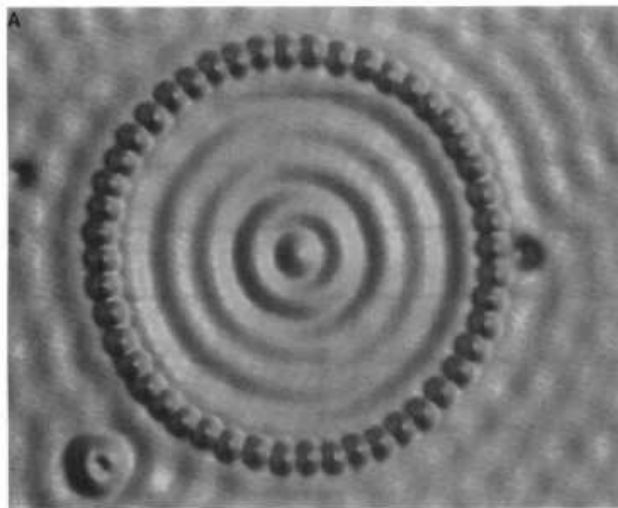


FIGURE 5 – Image des états stationnaires du cercle formé par les 48 atomes de fer disposés en cercle sur une surface de cuivre. Le diamètre moyen du cercle est de 14,3 nm. [11]

de d'énergie potentielle symétrique, où les deux électrodes sont au même potentiel tandis que le vide est modélisé par une énergie potentielle $W > 0$ égale au travail d'extraction des électrons des électrodes, de l'ordre de quelques électron-Volt pour les métaux typiques. Le profil d'énergie potentielle est représenté sur la figure 6.

2.1.1 Analyse classique

Considérons un électron, d'énergie $E = p^2/2m < W$ (en notant p son impulsion et m sa masse), incident depuis l'électrode 1. La mécanique classique interdisant à toute particule de se trouver dans une zone d'énergie potentielle supérieure à son énergie mécanique, l'électron fait donc face en $x = 0$ à une barrière infranchissable classiquement et y opère donc un demi-tour.

Du point de vue de la mécanique statistique, on peut montrer que la probabilité à une

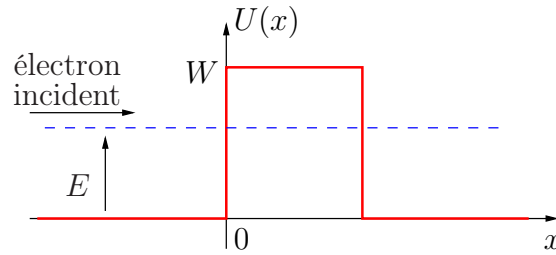


FIGURE 6 – Profil de potentiel simplifié.

température T que l'électron passe, *au-dessus et non à travers*, la barrière est proportionnelle au facteur de Boltzmann $\exp(-(W - E)/(k_B T))$. Cette loi fait écho à la loi d'Arrhénius bien connue en cinétique chimique. En prenant la quantité $(W - E)$ de l'ordre de l'électron-Volt et une température T de l'ordre de 300 K, on obtient un facteur de Boltzmann environ égal à 10^{-44} , autant dire que pour de telles températures, l'électron n'a guère de chance de franchir la barrière.

2.1.2 Analyse quantique

Seule une analyse quantique de ce phénomène permet de comprendre comment des électrons d'énergie inférieure à la barrière d'énergie potentielle imposée par le vide peuvent la traverser : c'est l'effet tunnel [4, 3].

Dans le cas d'une marche d'énergie potentielle ($d \rightarrow +\infty$), on montre que si $E < W$, alors l'électron est nécessairement réfléchi comme dans le cas classique. La différence fondamentale avec le cas classique est que l'électron a une probabilité de présence non nulle « dans la marche » ($x > 0$) sur une longueur typique [4, 3]

$$\rho^{-1} = \hbar / \sqrt{2m(W - E)} \quad (1)$$

On comprend alors que si la barrière d'énergie potentielle possède une longueur d pas trop supérieure à ρ^{-1} , la probabilité que l'électron puisse la traverser devienne non nulle, voire significative.

Pour préciser cela, décrivons l'état quantique de l'électron par sa fonction d'onde $\psi(x, t)$ et intéressons-nous uniquement à des solutions stationnaires d'énergie $E < W$ bien déterminées. Nous avons donc, en posant $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ et $\rho = \sqrt{2m(W - E)}/\hbar$, le système suivant à résoudre

$$x < 0 : \psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad (2)$$

$$0 < x < d : \psi(x) = Ce^{\rho x} + De^{-\rho x} \quad (3)$$

$$x > d : \psi(x) = Ee^{ikx} + Fe^{-ikx} \quad (4)$$

où les six constantes A , B , C , D , E et F sont à déterminer par application des conditions de raccordement de la fonction d'onde en $x = 0$ et $x = d$. L'électron provenant de la gauche, on choisit légitimement $F = 0$ (impossibilité que l'électron puisse revenir depuis la région $x > d$ puisqu'il ne s'y trouve aucune barrière d'énergie potentielle). Un calcul classique [4, 3] permet de déterminer la probabilité, notée T , que l'électron franchisse la barrière :

$$T = \frac{4E(W - E)}{4E(W - E) + W^2 \sinh^2(\rho d)} \quad (5)$$

Dans le cas, où $d \gg \rho^{-1}$ (approximation dite de « la barrière épaisse »), l'expression précédente simplifie en

$$T \simeq \frac{16E(W - E)}{W^2} \exp(-2\rho d) \quad (6)$$

Pour fixer les idées, prenons les valeurs utilisées par Binnig *et al.* dans leur expérience historique de 1982 [2] : $W \simeq 5$ eV, $E = 60$ meV. Calculons d'abord la distance caractéristique d'atténuation, $\rho^{-1} \simeq 0,09$ nm puis traçons l'évolution de T avec la distance séparant les deux métaux (figure 7).

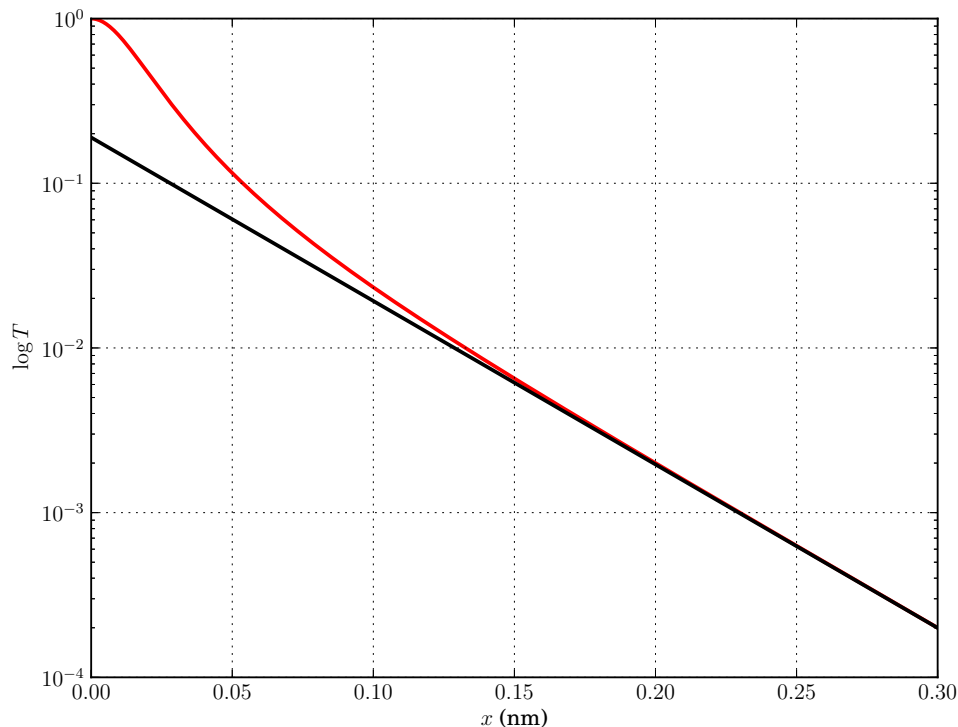


FIGURE 7 – Évolution de la probabilité de franchissement par effet tunnel en fonction de la largeur d de la barrière (d'énergie potentielle $W = 5$ eV pour un électron d'énergie $E = 60$ meV. En rouge : calcul exact de T , en noir : approximation de la barrière épaisse.

On note donc que pour des distances de l'ordre du dixième de nanomètre la probabilité de franchissement par effet tunnel est non négligeable.

Ce modèle est en fait trop simpliste car symétrique, il ne prend pas en compte la différence de potentiel imposée entre les deux métaux. En effet, la probabilité de franchissement par effet tunnel d'un électron de même énergie mais provenant de la droite est exactement identique à celle calculée précédemment, ce qui conduirait par compensation à un courant nul.

2.2 Deuxième approche à différence de potentiel non nulle

Simmons [8] a, en 1963, élaboré un modèle théorique visant à décrire le courant tunnel s'établissant entre deux électrodes portées à des potentiels différents. Nous allons ici reprendre

les grandes lignes de son article dont on peut trouver une adaptation française à la référence [7].

Considérons que l'électrode de gauche est reliée à la masse et que l'on porte l'électrode de droite à un potentiel $V > 0$, de manière à ce que les électrons puissent circuler de la gauche vers la droite. La situation est analogue à celle d'un condensateur plan porté à une différence de potentiel V . On sait alors que le champ électrique y est constant et dirigé de l'électrode positive vers l'électrode négative selon l'axe x . Ainsi, le potentiel électrique est décrit par une fonction affine de x tel que sa variation soit égale à V sur la distance séparant les deux électrodes. Par ailleurs, l'énergie potentielle d'une charge q portée à un potentiel V valant qV (ici $q = -e$), on en déduit que le profil d'énergie potentielle se déforme de la manière indiquée sur la figure 8.

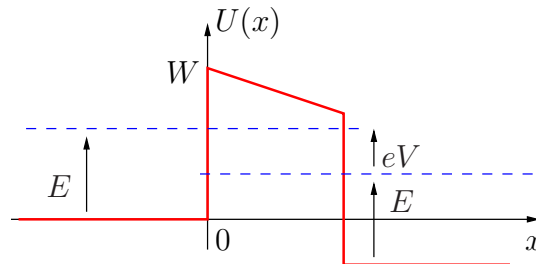


FIGURE 8 – Profil de potentiel prenant en compte la différence de potentiel V imposée entre les deux électrodes.

2.2.1 Analyse qualitative

Considérons deux électrons de même impulsion p (et donc de même énergie cinétique), l'un émis depuis la gauche (indiqué par 1), l'autre depuis la droite (indiqué par 2). L'électron de gauche possède une énergie $E_1 = E = p^2/2m$ tandis que celui de droite possède une énergie $E_2 = p^2/2m - eV = E - eV$, ainsi la probabilité de franchissement de la barrière plus grande pour l'électron de gauche que pour celui de droite. On comprend ainsi que dans cette situation, il va s'établir un courant électronique global de la gauche vers la droite.

2.2.2 Analyse quantitative

Résolution numérique Il est possible de déterminer numériquement la probabilité de franchissement par une telle barrière. La technique consiste à approximer le profil d'énergie potentielle par une fonction constante par morceaux de largeur Δx , telle que U soit constante sur tout intervalle de la forme $]n\Delta x, (n+1)\Delta x[$ ($n \in \mathbb{Z}$) et de valeur $U(x = n\Delta x)$. Sur chaque intervalle, la solution générale de l'équation de Schrödinger est de la forme :

$$\psi_n(x) = A_n e^{ik_n x} + B_n e^{-ik_n x}, \quad x \in]n\Delta x, (n+1)\Delta x[$$

où $k_n = \sqrt{2m(E - U(n\Delta x))}/\hbar$.

Reste ensuite à déterminer les coefficients A_n et B_n . Ceci se fait en appliquant les conditions de raccordement au niveau des frontières de chaque intervalle.

Sur les figure 9, sont présentées les formes des fonctions d'onde à énergie fixée selon que l'on applique une différence de potentiel négative ou positive entre les deux électrodes. On note bien que l'asymétrie de la marche d'énergie potentielle implique des valeurs différentes du coefficient de transmission expliquant ainsi la présence d'un courant tunnel.

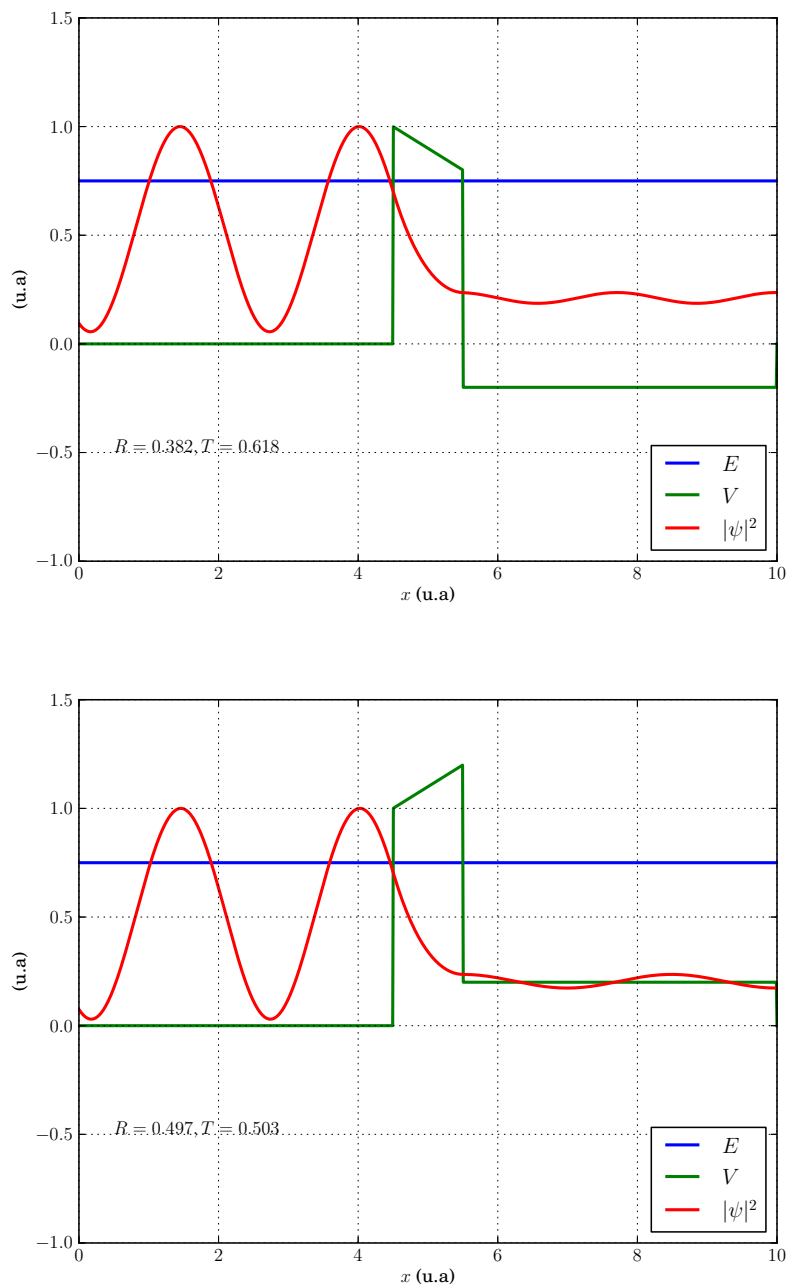


FIGURE 9 – Résolution numérique de l'équation de Schrödinger dans le cas d'une marche trapézoïdale. Notons V la différence de potentiel $V_2 - V_1$ imposée entre les deux électrodes. Haut : $V = V_0 > 0, T \simeq 0,62$. Bas : $V = -V_0 < 0, T \simeq 0,50$.

Résolution analytique Calculons à présent les probabilités T_1 et T_2 de franchissement de la barrière pour ces deux électrons de même impulsion. Nous avons ici affaire à un profil d'énergie potentielle non constant par morceaux. Dans un tel cas, il existe une solution approchée au

problème établie par Brillouin *et al.* On montre alors que

$$T_1(E) = T(E) \simeq \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_0^d \sqrt{2m(U(x) - E)} dx\right) \quad (7)$$

$$T_2(E) = T(E - eV) \simeq \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_0^d \sqrt{2m(U(x) - (E - eV))} dx\right) \quad (8)$$

On note, immédiatement que $T_1 > T_2$, révélant bien l'asymétrie du problème.

Pour aller plus loin, nous devons prendre en compte, non pas un électron, mais l'ensemble des électrons de chaque électrode qui possèdent des énergies et donc des vitesses a priori toutes différentes. Notons $n(v)$ la densité volumique d'électrons de vitesse v telle que la quantité $n(v)dv$ soit le nombre d'électrons par unité de volume de vitesse comprise entre v et $v + dv$. On peut leur associer une densité volumique de courant $dj = evn(v)dv$. En considérant que seule une fraction $T(E = mv^2/2)$ franchit la barrière, on en déduit la densité volumique de courant portée par les électrons allant de gauche à droite :

$$j_1(V) = e \int_0^\infty vn(v)T(mv^2/2)dv \quad (9)$$

De même, on en déduit la densité volumique de courant portée par les électrons allant de droite à gauche :

$$j_2(V) = e \int_0^\infty vn(v)T(mv^2/2 - eV)dv \quad (10)$$

Le courant net global de l'électrode de gauche vers celle de droite vaut donc

$$j(V) = j_1(V) - j_2(V) = e \int_0^\infty vn(v)(T(mv^2/2) - T(mv^2/2 - eV))dv \quad (11)$$

Encore une fois, on comprend que l'effet tunnel joue dans les deux sens mais que la différence de potentiel favorise le passage du courant de la gauche vers la droite conférant ainsi à j une valeur positive lorsque V est positif.

À partir de la connaissance de la fonction $n(v)$, et après des développements [8] bien trop calculatoires pour être exposés dans ce document, on obtient dans le cas limite ou $eV \ll W$ (ce qui est bien le cas dans les expériences de Binnig *et al.* [2]), la formule approchée suivante donnant la densité volumique de courant tunnel :

$$j(V) = \frac{V}{R_c} \frac{\rho}{4\pi d} \exp(-2\rho d) \quad (12)$$

où $R_c = h/2e^2$ est ce que l'on appelle le quantum de résistance. On en déduit que

$$\log j = \text{cte} - \frac{2}{\ln 10} \rho d - \log d \quad (13)$$

On sait que ρ^{-1} est de l'ordre de 0,1 nm et que la variation de d au cours d'une mesure est du même ordre de grandeur. Ainsi les variations de ρd au cours d'une mesure sont de l'ordre de l'unité tandis que celle de $\log d$ sont de l'ordre du centième d'unité. Ainsi, en première approximation le courant tunnel est bien une fonction décroissante de la distance séparant les électrodes. La mesure de la pente des courbes obtenues sur la figure 3 permet donc de déterminer ρ et par suite W .

3 Questions

1. Pourquoi, à votre avis, la pointe du microscope à effet tunnel doit être aussi fine en son extrémité ?
2. Quel est l'intérêt de travailler à courant tunnel constant lorsque l'on cartographie un échantillon ?
3. Binnig *et al.* [2]. ont travaillé dans un vide poussé de l'ordre de 10^{-9} bar, à température ambiante, calculer alors l'ordre de grandeur du nombre de molécules au mètre cube présentes dans ce « vide ». Pourquoi travailler dans un tel vide ?
4. À partir de la relation 13, retrouver les valeurs numériques du potentiel d'extraction W déterminé par Binnig *et al.* [2].
5. Sur la figure 4 est représenté la surface d'un cristal de plomb. Comment expliquer une telle répartition géométrique ?
6. Crommie *et al.* [11] ont réalisé un puits plat cylindrique (voir figure 5). Déterminer l'ordre de grandeur de l'énergie du niveau fondamental dans un tel puits.
7. Quelles améliorations pensez-vous qu'il faille apporter au modèle théorique, présenté ici, visant à expliquer la microscopie à effet tunnel ?
8. Écrire un algorithme de résolution numérique de l'équation de Schrödinger stationnaire unidimensionnel en s'appuyant sur la section 2.2.2.

Références

- [1] Microscope à effet tunnel,
http://iramis.cea.fr/Phocea/Vie_des_labos/Ast/ast_sstechnique.php?id_ast=225
- [2] Binnig, Rohrer, Gerber, Weibel, Applied Physics Letters **40**, 178 (1982)
- [3] J.M. Lévy-Leblond, F. Balibar, Quantique - Rudiments, Dunod (2006)
- [4] C. Claude Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloë, Mécanique quantique, Hermman (1998)
- [5] Le microscope à effet tunnel : un instrument quantique formidable,
<http://www.insp.jussieu.fr/Le-microscope-a-effet-tunnel-un.html>
- [6] http://www.iap.tuwien.ac.at/www/surface/STM_Gallery/stm_schematic.html
- [7] G. Baffou, Microscopie à effet tunnel - Modèles et Théorie,
<http://www.stm.baffou.com/theorieSTM.pdf> (2009)
- [8] Simmons, Journal of Applied Physics **34**, 1793 (1963)
- [9] Brillouin, Comptes rendus (Paris), **183**, 24-26 (1926)
- [10] <http://news.softpedia.com/newsImage/World-039-s-Thinnest-Superconductor-Is-Two-Atoms-Thick-2.jpg/>
- [11] M.F. Crommie, C.P. Lutz, D.M. Eigler. Confinement of electrons to quantum corrals on a metal surface. Science **262**, 218-220 (1993).