

Travaux Pratiques

MICROSCOPIE A EFFET TUNNEL

Préambule : Ce texte de TP s'inspire fortement du TP STM CESIRE mis en place par Pierre Mallet, chercheur CNRS à l'Institut Néel (Grenoble), spécialiste du STM.

A. Eléments théoriques

- **Introduction**

Ce TP doit vous permettre de vous familiariser avec une des facettes de la microscopie à sonde locale, la microscopie à effet tunnel. Le succès de cette technique tient essentiellement dans la prouesse suivante : un microscope à effet tunnel (STM, pour Scanning Tunneling Microscope) est en effet capable de réaliser la cartographie d'une surface conductrice avec une résolution spatiale de quelques angströms, ce qui permet une visualisation directe de l'arrangement atomique de la surface. Nous verrons que le STM mesure en fait les variations spatiales de la densité électronique au niveau de Fermi.

Le premier instrument fut développé par Binnig et Rohrer en 1982, il leur a valu un prix Nobel en 1986 .

- **Effet tunnel**

Considérons deux électrodes conductrices séparées par une barrière isolante (le vide, un oxyde...). Si la barrière est d'épaisseur nanométrique, les électrons ont une probabilité non nulle de passer d'une électrode à l'autre. Cet effet, interdit par la mécanique classique, est qualifié d'**effet tunnel**. Si l'on applique une différence de potentiel V_T entre ces deux électrodes, le transfert d'électrons par effet tunnel est asymétrique, donnant lieu à un courant tunnel I_T .

Dans le cas du STM, l'une des électrodes est une pointe métallique, l'autre est l'échantillon conducteur étudié. La pointe est maintenue à une dizaine d'angströms de la surface grâce à un dispositif décrit en III. En polarisant la jonction pointe/vide/échantillon, on crée **un courant tunnel qui est le signal mesuré par le STM**.

En licence, un exercice standard de la mécanique quantique est l'étude du passage d'un électron à travers une barrière isolante dans le cas unidimensionnel (figure 1). Ce calcul permet de décrire la dépendance du courant tunnel avec l'épaisseur de la barrière.

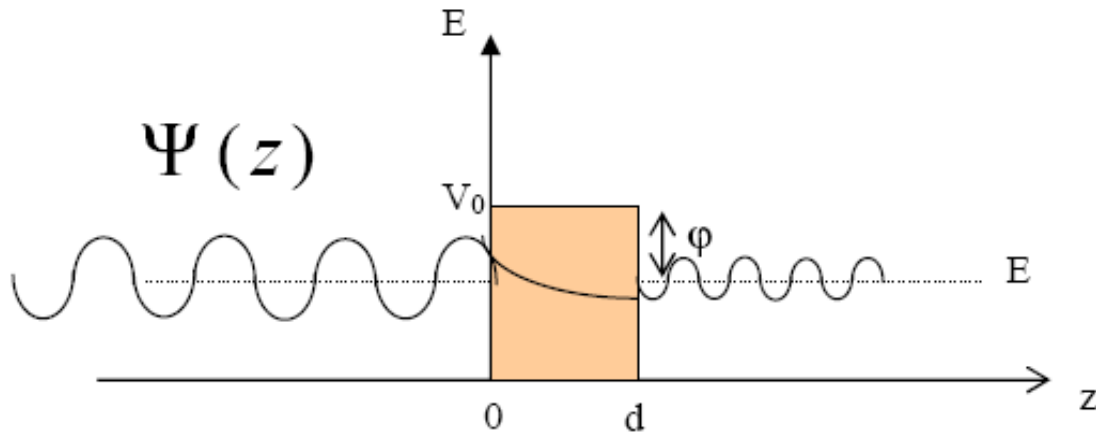


Figure 1. Représentation à 1D de l'effet tunnel

Hypothèses :

- C'est à une dimension (1D).
- Les électrons sont libres dans les électrodes (ondes planes).
- La barrière est supposée rectangulaire (électrodes identiques et V_T voisin de 0).

Le coefficient de transmission de la barrière T s'écrit, dans le cas d'une barrière fortement atténuante ($d \gg \sqrt{\hbar^2/2m\phi}$) :

$$T \propto e^{-2d\sqrt{2m\phi/\hbar^2}}$$

où $\phi = V_0 - E$ est la hauteur de barrière effective pour l'électron d'énergie E . On voit ici que le courant est une fonction exponentielle décroissante de la distance d . Typiquement, dans les bons métaux, $\phi \approx 4$ eV et donc $\sqrt{2m\phi/\hbar^2} \approx 1$ Å⁻¹.

Le courant est diminué d'un facteur 10 lorsque d augmente d'un Å.

Dans le cas de la géométrie du STM, cette relation reste vérifiée en première approximation (on le vérifiera expérimentalement). Cette sensibilité extrême du courant avec la distance pointe-surface est l'atout essentiel du STM.

- **Résultats de la théorie de Tersoff et Hamann**

Pour calculer le courant tunnel dans le cas d'une jonction STM, on voit déjà qu'il est nécessaire de prendre en compte une description plus juste des électrons dans les électrodes. Bardeen a donné le premier une expression du courant faisant intervenir les densités d'états électroniques des électrodes, lorsque celles-ci sont toutes les deux planes. Tersoff et Hamann ont repris l'approche de Bardeen mais en prenant en compte la géométrie bien particulière de la pointe (figure 2).

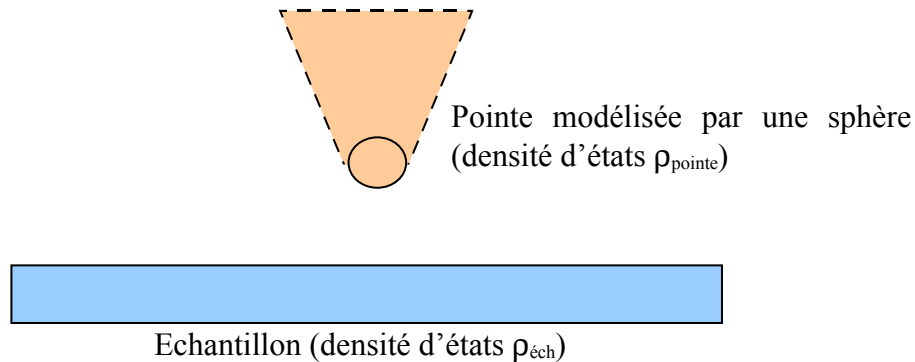


Figure 2. Géométrie de la jonction STM

Dans leur calcul, la pointe est modélisée par une sphère, et les électrons issus de la pointe ont une fonction d'onde évanescence à symétrie sphérique. Les électrons issus de l'échantillon sont décrits par une fonction de Bloch 2D avec une composante évanescence suivant z.

Calcul du courant tunnel par Tersoff et Hamann :

Hypothèses :

- Electrodes assez éloignées pour un calcul perturbatif.
- Electrodes métalliques (densités d'états constantes autour du niveau de Fermi).
- V_T négligeable par rapport au travaux de sortie des électrodes.
- $T = 0$ K

Expression de Tersoff et Hamann (E_F est l'énergie de Fermi et C est une constante) :

$$I = C \frac{e^2 V_T}{\hbar} \rho_{\text{éch}}(\vec{r}, E_F) \rho_{\text{pointe}}(E_F)$$

Cette expression montre qu'un STM sonde la densité d'états électronique locale de l'échantillon à l'énergie de Fermi et à la position \vec{r} de la pointe (plus exactement à la position du centre de courbure du bout de la pointe).

Si l'on déplace la pointe parallèlement à la surface, on peut mesurer alors les variations spatiales de la densité d'états. Du fait de la décroissance exponentielle du courant avec la distance, on montre que la résolution latérale du STM est de quelques angströms.

• **Effet de la tension tunnel**

En pratique, la densité d'états de l'échantillon (et de la pointe) peuvent dépendre fortement de l'énergie. Dans ce cas, l'expression de Tersoff et Hamann est insuffisante, et elle a été prolongée par Lang et Tossati à l'expression suivante :

$$I(V_T, \vec{r}) \propto \rho_{pointe}(E_F) \int_{E_F}^{E_F+V_T} \rho_{éch}(\vec{r}, E) dE$$

Hypothèses:

- Electrodes assez éloignées.
- La pointe a une densité d'états constante autour de E_F .
- V_T reste petit devant le travail de sortie.
- $T = 0$ K

Le courant tunnel est en fait l'intégrale de la densité d'états locale de l'échantillon entre E_F et $E_F + V_T$.

La figure 3 illustre ce résultat :

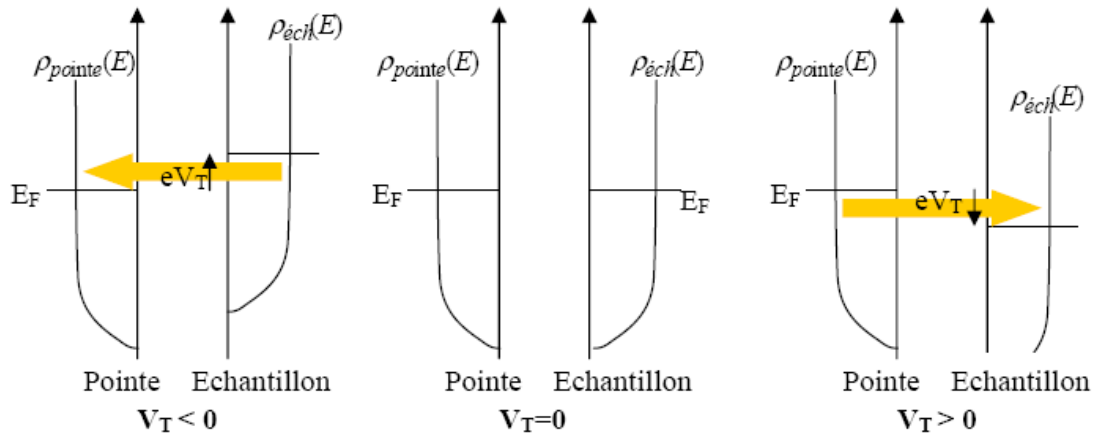


Figure 3. Diagramme énergétique d'une jonction tunnel polarisée (V_T est appliqué à l'échantillon).

Pour un échantillon dont la DOS est constante autour du niveau de Fermi, on retrouve que le courant est linéaire avec V_T (comportement ohmique) comme le prédit la théorie de Tersoff et Hamann.

B. Présentation et fonctionnement du STM

Practical presentation of the STM microscope

The microscope used for this practical work is a commercial STM from Easyscan, sold by the Nanosurf Company.

In general the STM microscope contains three parts: the head, the electronic module and the software control.

- **STM head**

The microscope head is composed by a rigid part where is fixed one or several piezoelectric ceramics. A piezoelectric material has the property to deform itself when it is submitted to an external electrical field. In reverse, a mechanical constraint leads to the apparition of electric charges on its surface. The piezoelectric effect has been discovered by Curie in 1880. In the STM microscope this effect is used to move the tip on the surface with nanometric resolution.

If a voltage is applied between the two faces of a piezoelectric material which are separated by the distance h , an electric field $E = V/h$ appears between the two faces and induces a deformation of the material $\delta h/h = d_{33} \cdot E$ in the electric field direction, where d_{33} represents the piezoelectric constant in the polarisation axis. Typically, the piezoelectric coefficients do not exceed few Å by volt.

The STM microscope used in this practical works (figure 4) is constituted by two elements: the sample holder and the tip holder.

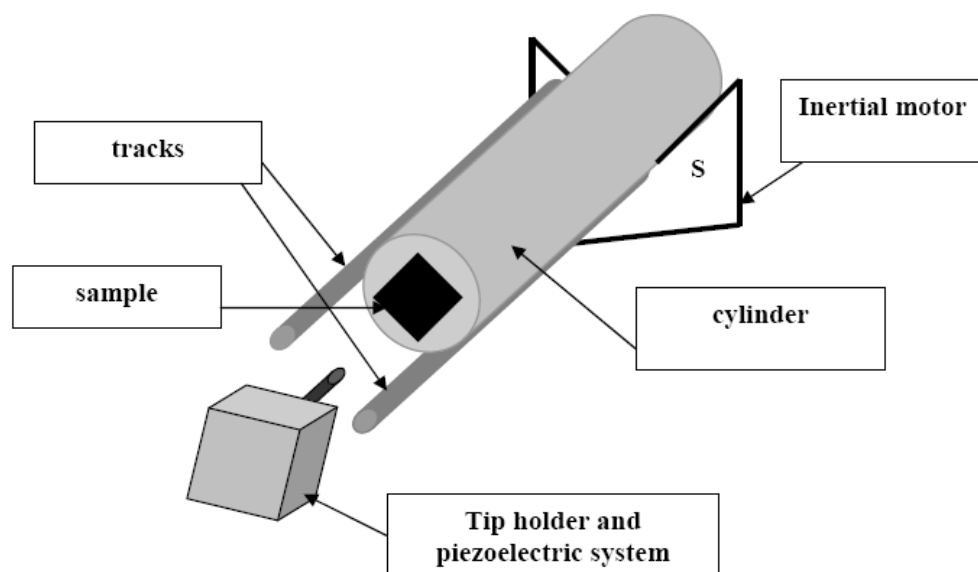


Figure 4 : Easyscan STM head

Tip holder : The tip is fixed to a metallic part (which also allows collecting the tunnelling current), this metallic part is glued on a piezoelectric system, which is constituted by three piezoelectric cubes in order to allow the displacement of the tip in three spatial directions. In presence of a sample and in tunnelling regime, the X and Y movements allow moving the tip across the surface, and the Z direction movement allow keeping the tunnelling current at a constant value.

Sample holder : The sample is glued on a conductive disc. This disc is fixed at the cylinder apex thanks to a magnet placed in the middle of the cylinder. The sample, the metallic disc and the cylinder forms a rigid system. This system can slide on two cylinder tracks in order to approach to the tip. To measure a tunnelling current, the tip-surface distance must be reduce to few nanometers, this approach is realised with an inertial approach motor: The displacement of the cylinder is made by a succession of nano-movements of the support S stuck to a piezoelectric element. During the practical work, we will study the working mode of this approach system. During this approach phase a tunnelling current can be detected, therefore the approach stops immediately, the tunnelling regime is reached.

- ***Electronics module***

- a/ ***Current-voltage amplifier :***

For usual tunnelling voltage (from few mV to few volts), the tunnelling current measured by the STM is relatively low (few pA to few nA). This low value is due to the local character of the measurement. In order to measure with accuracy the I_T current detected by the tip, the current is amplified and converted in a voltage through a current-voltage pre-amplifier located close to the STM head. The figure 5 is a simplified version of this pre-amplifier :

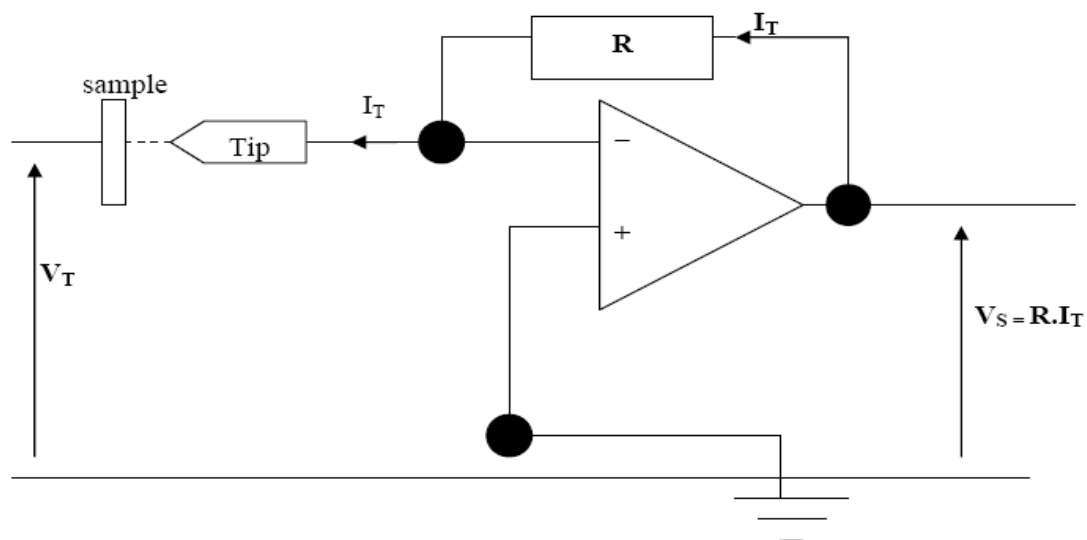


Figure 5 : simplified diagram of the current-voltage pre-amplifier

b/ Control electronics module :

This electronics module which is associated to the PC Pentium 200, is composed by :

- a 16 bits DAC and ADC card : this card converts the analogical signals to digital signal and vice-versa.
- voltage amplifier +/- 12V : these amplifiers are needed to apply voltages at the different piezoelectric elements, from digital ramp generated by the software and converted in analogical signals by the DAC card.

The tunneling current I_T , is converted to a voltage V_S at the output of the preamplifier, and V_S is digitalized by the DAC card. The analogical feedback loop compares V_S to a regulation value fixed by the user, and deduces the error signal ΔZ , which is converted again by the DAC card in analogical signal, which is applied to the piezoelectric element in order to re-find the regulation value. This feedback loop is running continuously in imaging mode, this mode is called constant tunneling current mode. The error signal ΔZ is recorded during the scan X,Y. All the $\Delta Z(X,Y)$ points form the STM image.

This analogical feedback loop is described in figure 6 :

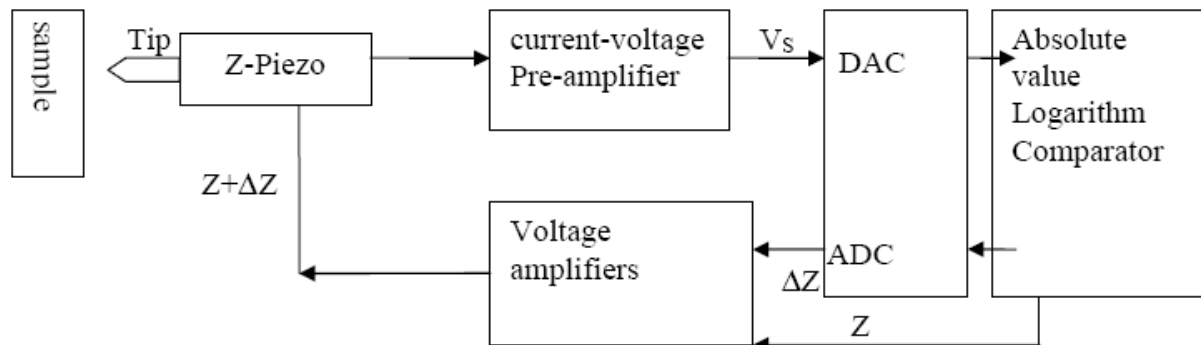


Figure 6 : tunneling current feedback loop

- **Easyscan software**

A detailed description is available during the practical work.

C. Déroulement du TP

- **Etape 1 : Utilisation du moteur inertiel**

Eviter de manipuler le cylindre et de toucher les rails avec les doigts, donc mettez des gants lors des manipulations.

a/ Monter une pointe en platine/iridium sur le porte pointe.

b/ Déposer le cylindre sur le chariot à vide (sans échantillon).

c/ Vérifiez que le moteur permet de déplacer le chariot par rapport à la pointe dans la gamme de quelques millimètres.

d/ Analyser le fonctionnement du moteur inertiel. Aidez vous des fascicules de nanosurf à votre disposition dans la salle de TP.

- **Etape 2 : Imagerie d'une surface de graphite**

a/ Préparation de la surface de graphite (à faire avec l'équipe pédagogique)
Décrire en vous aidant des documents la structure du graphite.
Cliver la surface de graphite en utilisant un morceau de ruban adhésif.
Placer l'échantillon sur le chariot.

b/ Réaliser l'approche de la pointe comme décrit sur le fascicule Nanosurf.
Procédez à des images à grand champ (~ 400 nm de côté)
Expliquer ce qu'est une terrasse et donner une estimation de la taille des terrasses.

c/ Visualisation de l'arrangement atomique à la surface du graphite.
Décrire le type de maille observé et mesurer ses paramètres directement sur l'image.

- **Etape 3 : Spectroscopie**

Sur une zone plate à l'échelle atomique sur laquelle vous obtenez une image stable (les paramètres de la boucle de régulation sont alors bien choisis), sélectionner le mode spectroscopie et réalisez les deux types de spectroscopies suivantes :

a/ $I = f(V)$ à savoir l'intensité du courant tunnel en fonction de la tension pointe-surface pour une distance pointe-surface *fixe*.
Enregistrez et commentez les courbes obtenues sur différents intervalles de tensions.

b/ $I = f(Z)$ à savoir l'intensité du courant tunnel en fonction de la distance pointe-surface pour une tension pointe-surface *fixe*.
Enregistrez et commentez la courbe obtenue.