Le microscope à effet tunnel *

par Bernard LEROY, 1817/14 E, I.B.M. France, B.P. 58, 91102 Corbeil-Essonnes.

Gerd BINNIG et Heinrich ROHRER, chercheurs au laboratoire I.B.M. de Zurich, ont reçu le prix Nobel de Physique pour 1986 pour la mise au point du microscope à effet tunnel. Ce microscope permet de réaliser une topographie des surfaces, avec une résolution latérale meilleure que 1 Å et une résolution verticale de 0,1 Å; il permet donc de « VISUALISER DES ATOMES ». Il permet de plus de déterminer les niveaux d'énergie des électrons « de surface » et les constantes de force des atomes adsorbés, par des mesures spectroscopiques.

1. L'EFFET TUNNEL.

Un solide peut être décrit comme un assemblage de noyaux atomiques et d'électrons. Pour arracher un électron à ce solide, il faut fournir une énergie minimum, $q \phi_m$, que l'on peut mesurer comme énergie minimum de l'effet photoélectrique.

Mais la mécanique quantique prévoit que même si l'électron a une énergie plus faible que ϕ_m , la probabilité qu'il se trouve à l'extérieur du solide, à la distance d, est proportionnelle à :

 $\exp - B \sqrt{q \phi_m} d \quad \text{avec} \quad B = 1,025 \text{ eV}^{-5} \cdot \text{\AA}^{-1}.$

Si donc, on place un autre métal à la distance d_0 du premier, il est capable de capturer les électrons pour lesquels :

$$d > d_0$$
.

L'échange d'électrons entre les deux solides représente un courant I (fig. 1).

$$I = [A(V - V_0)/d] \exp - B\sqrt{q} \phi d$$

où V est le potentiel appliqué, $V_0 = \phi_{m2} - \phi_{m1}$, $\phi_{m1} + \phi_{m2} = 2\phi$ A varie lentement avec ϕ et d, ϕ varie lentement quand V croît.

^(*) Ce texte résume l'exposé fait lors des Journées de l'Union des Physiciens à Reims, le 31 octobre 1986.



E : énergie des électrons.

q ϕ_M : énergie minimum d'extraction d'un électron du solide.

Z : distance à la surface.

E_F : niveau de Fermi dans le solide.

E_V : énergie des électrons dans le vide.



 $N_{\rm E}$: nombre d'électrons à la distance Z de la surface. J_1 : flux d'électrons à travers une surface à la distance D de la surface.



V : différence de potentiel appliquée.

I : courant tunnel.

Fig. 1. - Explication de l'effet tunnel.

Les électrons ont donc traversé l'espace séparant le solide 1 du solide 2 sans avoir l'énergie nécessaire, c'est-à-dire qu'ils ont franchi la « barrière d'énergie » non par-dessus, mais par l'intérieur, comme à travers un tunnel; d'où le nom d'effet tunnel, découvert par Fowler et Nordheim en 1928.

Remarque :

Comme $q \phi_m$ vaut entre 2 et 6 eV, l'intensité est négligeable dès que *d* dépasse quelques dizaines d'Angströms.

La fig. 2 montre que près d'une pointe, presque tout le courant tunnel passe par la pointe, même si elle a la dimension d'un atome !



Fig. 2. — Courant tunnel au bout d'une pointe. % indique le pourcentage du courant passant par la zone rayée.

2. LE MICROSCOPE (STM).

Le microscope à balayage à effet tunnel (Scanning Tunnelling Microscope, le STM) mesure le courant tunnel passant entre une pointe et une surface. Pour avoir une résolution permettant d'étudier les atomes un par un, il faut :

- 1. Avoir une pointe très fine, dont le bout ne soit pas arrondi mais constitué par un atome.
- 2. L'approcher à moins de 50 Å de la surface à étudier.
- 3. Etre capable de réguler les déplacements de la pointe et de les mesurer à mieux que 0,1 Å. Ceci est réalisé grâce à l'action de 3 quartz piézoélectriques QX, QY, QZ.
- 4. Eliminer les vibrations qui perturbent la mesure.

Si des essais avaient été effectués en 1971, il a fallu attendre 1981 pour que BINNIG et ROHRER résolvent tous ces problèmes.

La fig. 3 montre des photos des différentes générations d'équipement. Le problème des vibrations a été le plus délicat





(d)

Fig. 3. — Les différents types de STM du laboratoire IBM à Zurich IBM J. Res. Dev. 30, 359 (1986). © IBM Corp.

1273

à résoudre. Pour « éliminer » les vibrations externes, ils ont d'abord utilisé des phénomènes de lévitation en utilisant des matériaux semi-conducteurs ; ensuite, ils ont préféré des couplages mécaniques (par barres de torsion), associés à des courants de FOUCAULT comme amortisseurs ; enfin ils ont utilisé des simples tampons de caoutchouc. Pour éliminer les vibrations internes, la solution finale a été de réaliser une liaison très rigide entre la pointe et l'échantillon, dont les modes propres de vibration étaient bien au-dessus des modes de vibration externes.

3. PRINCIPE DE LA MESURE.

Le montage du cœur de l'équipement est présenté sur la fig. 4 : la pointe est approchée de la surface à une distance d et elle se déplace dans les directions X, Y, Z grâce aux trois quartz piézoélectriques QX, QY, QZ; le point de l'espace correspondant à la pointe est donc mesuré par les potentiels de commande des quartz.





QX, QY, QZ quartz piézoélectriques, QX et QY permettent le balayage parallèlement à la surface, QZ permet de réguler la distance de la pointe à la surface.

Fig. 4. — Montage :

On impose une différence de potentiel V et on mesure le courant I (d'où on peut connaître dI/dV). Le courant est ensuite amplifié.

On dispose donc de cinq variables, X, Y, Z, V, I.

Pour faire une topographie, on fixe V, et on maintient I constant en agissant sur QZ.

Pour faire de la spectroscopie, on fait varier soit Z, soit V à X et Y donnés.

1274

L'information obtenue est une combinaison entre les caractéristiques de la surface explorée et les caractéristiques de la pointe. L'interprétation de la mesure requiert le plus souvent d'avoir au moins une vague idée de la structure attendue. La résolution latérale est limitée par la largeur de la zone de passage du courant. La fig. 5 montre que cette zone ne fait que 2 Å



Fig. 5. - Influence de la forme de la pointe sur la résolution.

de diamètre pour une pointe où un atome est plus en pointe que les autres (pointe rugueuse), mais de plusieurs dizaines d'Å pour une pointe bien arrondie. Une méthode a été mise au point à I.B.M. Zurich pour fabriquer des pointes de tungstène se terminant par un atome unique reposant sur 3 autres atomes. La résolution est alors de 2 Å en X et Y. La résolution verticale est avant tout limitée par la stabilité mécanique et la sensibilité aux vibrations. On peut l'estimer au mieux à 0,05 Å. D'autres phénomènes parasites peuvent intervenir : fluctuations du courant ou de la chaîne d'amplification, non uniformité des potentiels ϕ , effets d'atomes voisins du point de mesure.

Quand la détermination grossière de la structure a été effectuée, on peut traiter l'image de manière à soustraire les bruits : soit les bruits de l'électronique, soit les bruits dus à l'évolution de la surface (diffusion superficielle), la mesure de ce dernier bruit étant donc une caractéristique fondamentale de la surface.

4. TOPOGRAPHIES.

On balaye la surface en X et en Y grâce à QX et QY. On maintient V constant, ainsi que I en jouant sur la distance d'entre la pointe et la surface grâce à QZ. La position de la pointe décrit une courbe « parallèle » à l'équipotentielle E(V) (fig. 6). On trace ainsi les positions des équipotentielles de surface pour un V donné.



Fig. 6. — Principe de la mesure en topographie.

Les fig. 7 et 8 représentent deux applications spectaculaires de cette technique dans l'étude des reconstructions des surfaces : RECONSTRUCTION 7×7 DE LA SURFACE DU SILICIUM (111) (fig. 7) :



Fig. 7. — Structure atomique 7×7 reconstruite du silicium (111).



d

Fig. 7 bis. - Densité électronique du silicium près de la surface (111) reconstruite, fonction de la profondeur :

a : atomes superficiels ; b : liaisons « pendantes » de la première couche atomique; c : idem pour la 2e couche; d : liaisons internes.

Les théoriciens avaient prévu qu'à cette surface les atomes se réorganisent en une cellule de forme losange dont le côté correspond à 7 distances interatomiques. Cette structure 7×7 a été mise en évidence avec les 12 atomes en relief prévus, et les différentes liaisons calculées

MARCHES A LA SURFACE DE L'OR (100) (fig. 8) :

La topographie montre que la surface comporte des marches correspondant à l'ajout d'un seul plan atomique. Il y a peu d'atomes adsorbés ou d'autres défauts.



Fig. 8. — Marches à la surface de l'or. © IBM J. Res. Dev. 30, 357 (1986)

Les topographies sont aussi précieuses dans l'étude des matériaux à structure lamellaire.

Elles permettent d'étudier des cinétiques : en faisant plusieurs topographies successives de la même zone et en les comparant, on peut déterminer les sites où des atomes ont été absorbés, désorbés, et ceux où ils ont migré (diffusion de surface). Si cette diffusion est rapide, ces mouvements apparaissent comme un bruit sur la somme des signaux des mesures successives.

Enfin, en opérant à l'air ou dans l'eau, on peut déterminer des structures biologiques (ADN, VIRUS...), sans les tuer.

5. SPECTROSCOPIE.

Le STM peut être utilisé pour obtenir des informations sur la distribution des niveaux électroniques près de la surface : on dit alors qu'il fonctionne en mode STS (Scanning Tunnelling Spectroscopy).

Détermination du niveau de Fermi et du travail de sortie ϕ_m :

On fixe d'abord X et Y; on enregistre I en fonction de la distance d entre la pointe et la surface; si la valeur de I est une fonction linéaire de V, I varie avec d comme exp $-(B\sqrt{\phi_m} d)$, d'où on tire $\sqrt{\phi_m}$. Ceci se produit pour d assez grand (plus de 10 Å) et pour V assez petit. En faisant varier X et Y, on peut réaliser une topographie de ϕ_m , regarder ses variations dues aux charges locales ou aux charges image.

DENSITÉ D'ÉTATS ÉLECTRONIQUES N (E) DANS LE SUBSTRAT :

On fixe X, Y et Z et on enregistre la dérivée dI/dV en fonction de V. L'accroissement du courant est dû au fait que, quand on augmente V, de nouveaux électrons peuvent « tunneller », augmentant le courant. dI/dV est donc une mesure de la densité d'états électroniques au niveau ($\phi_m + V$) sous le niveau du vide, dans l'échantillon (fig. 9).



Quand V est appliqué, le courant tunnel est I : il provient de la zone hachurée. Si on change V de dV, I change de dI parce que les électrons de la zone quadrillée ne passent plus. La variation dI est donc proportionnelle au nombre de ces électrons, soit N (E), dV. Donc :

$$dI/dV = C \cdot N(E).$$

Fig. 9. — Détermination de la densité électronique N (E) par variation du potentiel appliqué V.

EXEMPLE : ADSORPTION DE L'OXYGÈNE PAR LE NICKEL :

La fig. 10 montre un pic à 0.8 V caractéristique de l'oxygène adsorbé; en faisant l'enregistrement de dI/dV pour V = 0.8 V, en fonction de X et Y, on obtient une topographie des zones d'adsorption et on découvre ainsi que les atomes d'oxygène sont alignés sclon des directions préférentielles.

SUPRA-CONDUCTEURS :

La méthode STS est très sensible aux transitions de phase et a été appliquée avec succès à l'étude des transitions de supraconducteurs Nb_3Sn .



Fig. 10. — Image spectroscopique et structurale de l'oxygène sur une surface de nickel (100): (a) montre le pic à 0,8 V caractéristique de NiO, en mode dI/dV; (b) compare les modes STS et STM : alors que le mode STM montre qu'il n'y a pas de relief (profil plat), le mode STS montre le changement de nature chimique entre un îlot de NiO (à gauche) et la surface nue (à droite). Echelles Y et Z : 5 Å.

(D'après G. BINNIG et al. Phys. Rev. B 33, 4439 (1986).

6. LES MODELES ACTUELS.

La modélisation du fonctionnement des STM et STS n'est pas encore achevée : deux types de modèles sont utilisés :

* Hamiltonien de transfert : la pointe trace des contours de même densité de la fonction d'onde électronique, évaluée à partir du centre de la pointe supposée sphérique.

* Transmission directe : on essaie de déterminer la distribution des courants dans la zone de passage des électrons.

Quand d n'est pas trop petit, ces deux approches donnent des résultats voisins.

7. AVANTAGES DU STM/STS.

— Il n'utilise pas de faisceau excitateur, donc n'a pas besoin de source (de lumière ou d'électrons); il ne nécessite pas d'optique. La mesure est directe, sans correction de rendement entre le phénomène et sa mesure comme dans les microsondes.

— La visualisation se fait dans l'espace réel, sans passage par des transformées de FOURIER comme dans les diffractions.

— La mesure est non destructive, sans perturbation : elle se fait dans tout milieu fluide isolant : vide, air, eau, azote ou hélium liquides, gaz à adsorber ou à faire réagir. Ces milieux fluides sont bienvenus pour l'étude des cellules vivantes, ou l'étude des réactions *in situ*.

- L'analyse est locale, faite à haute résolution, permettant d'identifier les positions individuelles des atomes, des liaisons, de déterminer les niveaux énergétiques par spectroscopie.

— Ne détruisant pas les échantillons, elle peut être couplée à d'autres méthodes de mesure dont elle améliore la connaissance.

Il n'est qu'à voir le nombre d'applications pour comprendre que les STM/STS sont un des fondements des études à l'échelle de l'atome pour les décennies prochaines.

BIBLIOGRAPHIE

En français :

G. BINNIG et H. ROHRER : Le microscope à balayage à effet tunnel Pour la Science n° 96, p. 22 (octobre 1985).

F. SALVAN : Le microscope à effet tunnel, La Recherche n° 181, vol. 17, p. 1202 (octobre 1986).

Articles historiques (en anglais) :

G. BINNIG, H. ROHRER, Ch. GERBER et E. WEIBEL :

Applied Physic Letters 40, 178 (1982).

Physical Review Letters 49, 57 (1982); 50, 120 (1983).

Bilan actuel (en anglais) :

IBM Journal of Resarch and Development, Vol. 30, N° 4 et 5, juillet et septembre 1986 : 200 pages sur cette technique forment le contenu de deux numéros spéciaux de la revue. Pour se les fournir, écrire à :

IBM journal of Research and Development, IBM Corporation, Armonk, New York 10504, U.S.A.

Les photographies accompagnant le texte sont dues aux chercheurs du laboratoire IBM de Zurich, et certaines ont été publiées dans *IBM Journal of Research and Development*.