

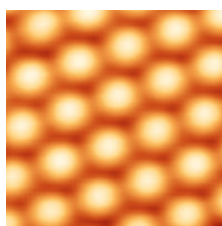
Microscopie à effet tunnel (STM)

GARCIA CASTILLO Javier
MARGINET BALLESTER Iker
L3 Physique – Université Paul Sabatier

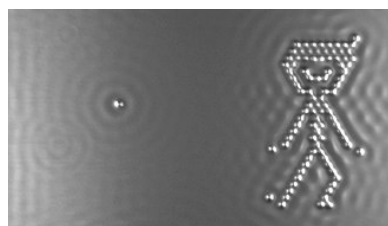
1 Introduction

La microscopie à effet tunnel (Scanning Tunneling Microscope, « STM ») est une technique capable de produire des images à résolution atomique des surfaces analysées, ce qui permet d'obtenir des informations détaillées sur leur structure chimique. De plus, comme les images sont obtenues en temps réel, il est possible d'étudier les processus moléculaires qui se déroulent à la surface de l'échantillon, en enregistrant les différentes étapes du processus.

D'autre part, la technique STM permet de manipuler des molécules et des atomes individuels avec une précision de l'ordre du nanomètre, grâce aux interactions entre la pointe et l'échantillon. Le premier STM a été construit en 1981 par Gerd Binnig et Heinrich Rohrer (raison pour laquelle ils ont reçu le prix Nobel de physique en 1986). Depuis son invention, cette technique a été perfectionnée pour permettre l'étude dans d'autres environnements comme l'air, l'eau, ainsi qu'à des températures très élevées (plus de 1300 K).

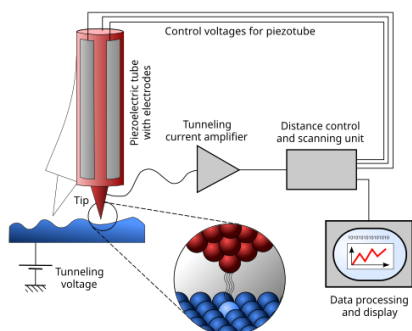


(a) Atomes de silicium à la surface d'un cristal de carbure de silicium (SiC).



(b) Extrait de « A Boy and His Atom », une vidéo réalisée par IBM avec des molécules de CO.

2 Principes de fonctionnement du STM



Dans le STM, une pointe métallique très fine (composée d'un ou de quelques atomes d'épaisseur) est approchée d'un échantillon conducteur à une distance pouvant aller jusqu'à 1 nm, et une petite tension d'environ 0,1 V est appliquée entre les deux. Cette proximité et cette différence de potentiel entraînent un flux d'électrons de la pointe vers l'échantillon (ou inversement, selon la polarité de la tension), traversant la barrière représentant l'espace entre les deux (normalement du vide), produisant ainsi le phénomène de mécanique quantique connu sous le nom d'*effet tunnel*.

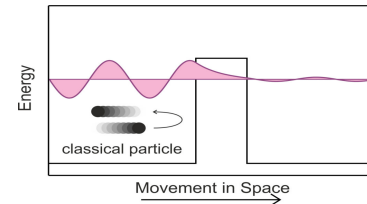
Ces électrons produisent un courant que l'on peut mesurer, lequel dépend exponentiellement de la distance entre la pointe et l'échantillon. Par exemple,

si un courant de 1 nA est mesuré pour une distance déterminée, un changement de 0,1 nm peut réduire ce courant d'un facteur 10. Grâce à cet effet, il est possible d'obtenir des images avec une résolution atomique.

Une fois le courant tunnel établi, la pointe balaie l'échantillon avec une précision nanométrique grâce à un scanner composé de céramiques piézoélectriques, qui se compriment ou se dilatent en fonction de la tension appliquée. Le scanner a pour rôle de maintenir le courant tunnel constant en ajustant la position en X , Y et Z de la pointe. Ce mode STM, appelé *mode à courant constant*, est le plus courant et est utilisé pour les échantillons présentant un relief important. Un autre mode STM est le *mode à hauteur constante*, dans lequel les variations du courant tunnel nécessaires pour maintenir constante la distance entre la pointe et l'échantillon sont enregistrées. Cependant, ce mode est rarement utilisé, car il nécessite que l'échantillon soit atomiquement plat.

3 L'effet tunnel : Fondement de la mécanique quantique

En mécanique classique, un électron d'énergie E ne peut pas traverser une barrière de potentiel V_0 si $E < V_0$, car cela impliquerait une énergie cinétique négative. En revanche, la mécanique quantique prédit une probabilité non nulle de transmission à travers une telle barrière : c'est l'effet tunnel.



Équation de Schrödinger indépendante du temps

Considérons un électron de masse m , soumis à un potentiel rectangulaire unidimensionnel :

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < 0 \\ V_0 & \text{si } 0 \leq x \leq d \\ 0 & \text{si } x > d \end{cases}$$

L'équation de Schrödinger indépendante du temps s'écrit :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

Solutions par morceaux

Région I ($x < 0$) : $V(x) = 0$

$$\begin{aligned} \frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi &= 0, \quad \text{où } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \\ \Rightarrow \psi_I(x) &= Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \end{aligned}$$

Région II ($0 \leq x \leq d$) : $V(x) = V_0$, avec $E < V_0$

$$\begin{aligned} \frac{d^2\psi}{dx^2} - \kappa^2\psi &= 0, \quad \text{où } \kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \\ \Rightarrow \psi_{II}(x) &= Ce^{\kappa x} + De^{-\kappa x} \end{aligned}$$

Par condition physique (fonction bornée), on impose $C = 0$, donc :

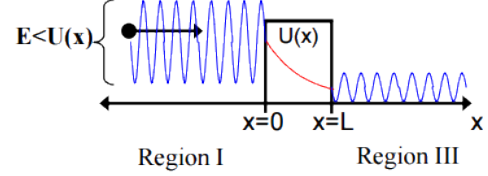
$$\psi_{II}(x) = De^{-\kappa x}$$

Région III ($x > d$) : $V(x) = 0$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0 \Rightarrow \psi_{III}(x) = Fe^{ikx}$$

Conditions de continuité

On impose la continuité de $\psi(x)$ et de sa dérivée $\psi'(x)$ aux bornes $x = 0$ et $x = d$. Cela permet d'établir les relations entre les coefficients A, B, D, F , mais ici on s'intéresse surtout à la probabilité de transmission.



Approximation WKB

Pour une estimation de la transmission, on utilise l'approximation semi-classique (WKB), qui donne :

$$T \approx \exp\left(-2 \int_0^d \sqrt{\frac{2m(V(x) - E)}{\hbar^2}} dx\right)$$

Dans le cas d'une barrière rectangulaire de hauteur constante $V(x) = V_0$, l'intégrale devient :

$$T \approx \exp(-2\kappa d), \quad \text{avec } \kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

4 Résultats théoriques appliqués

4.1 Calcul du coefficient d'atténuation κ

Prenons :

- $V_0 - E = 5 \text{ eV} = 5 \times 1.602 \times 10^{-19} \text{ J}$
- $m = 9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}$
- $\hbar = 1.055 \times 10^{-34} \text{ J s}$

Le coefficient κ est :

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} = \sqrt{\frac{2 \times 9.11 \times 10^{-31} \times 5 \times 1.602 \times 10^{-19}}{(1.055 \times 10^{-34})^2}} \approx 1.14 \times 10^{10} \text{ m}^{-1}.$$

4.2 Calcul de la transmission T

Pour une distance $d = 1 \text{ Å} = 1 \times 10^{-10} \text{ m}$:

$$T = \exp(-2\kappa d) = \exp(-2 \times 1.14 \times 10^{10} \times 1 \times 10^{-10}) = \exp(-2.28) \approx 0.102.$$

Donc environ **10%** de probabilité de transmission.

4.3 Estimation du courant tunnel I_t

Le courant tunnel est proportionnel à la densité d'états $\rho(E_f)$, à la vitesse v , et à la probabilité de transmission T :

$$I_t \propto \rho(E_f) V v q^2 T$$

En supposant :

- $\rho(E_f) \approx 10^{28} \text{ m}^{-3} \text{ eV}^{-1}$,
- $v \approx 10^6 \text{ m s}^{-1}$,
- $V \approx 0.1 \text{ V}$,

on trouve :

$$I_t \sim \frac{1}{2} \times 10^{28} \times 0.1 \times 10^6 \times (1.6 \times 10^{-19})^2 \times 0.1 \approx 1 \text{ nA}.$$

Ce courant est en accord avec les valeurs typiques mesurées expérimentalement.

4.4 Remarque sur le modèle utilisé

En pratique, la barrière n'est pas strictement rectangulaire (pointe arrondie, champs électriques locaux), mais cette approximation reste raisonnable pour expliquer la dépendance exponentielle du courant tunnel avec la distance.

5 Applications du STM en nanophysique

Étant donné que le STM permet d'observer des surfaces à l'échelle atomique et d'étudier des phénomènes quantiques tels que l'effet tunnel, il possède de nombreuses applications dans le domaine des nanotechnologies, de la science des matériaux et de la physique des surfaces :

- **Imagerie à l'échelle atomique** : Grâce à sa capacité à fournir des images à résolution atomique, le STM est devenu un outil indispensable pour l'étude et la visualisation des surfaces atomiques. Il permet d'examiner les structures de surface et les défauts atomiques dans des matériaux tels que les semi-conducteurs, les métaux et les composés organiques. On peut également l'utiliser pour obtenir des informations détaillées sur la forme et la disposition des atomes.

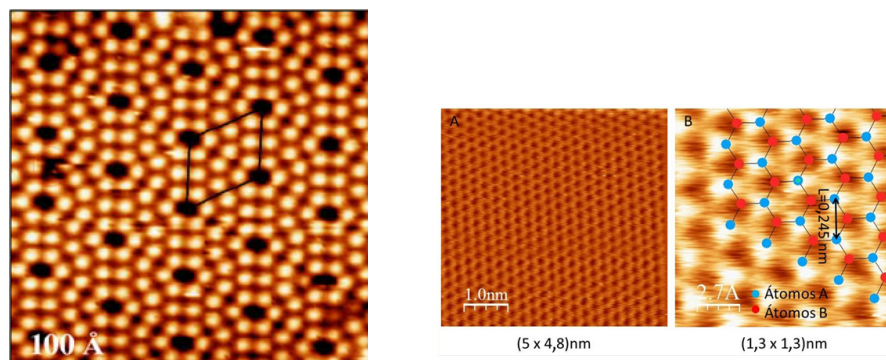


FIGURE 2 – À gauche : image STM du Si(111). À droite : image STM du HOPG en condition ambiante.

- **Manipulation des atomes et des molécules** : Le microscope à effet tunnel (STM) ne se limite pas à l'observation des surfaces à l'échelle atomique : il permet aussi une manipulation directe et précise des atomes et des molécules. Grâce à l'interaction entre la pointe du microscope et les atomes de la surface, il est possible de déplacer, assembler ou retirer des atomes un par un, ouvrant la voie à la construction contrôlée de structures nanoscopiques. Cette capacité est essentielle pour les domaines émergents comme la nanofabrication, la logique moléculaire et même le stockage de données à l'échelle atomique. L'une des démonstrations les plus emblématiques fut réalisée en 1990, lorsque des chercheurs d'IBM ont utilisé un STM pour écrire "IBM" en atomes de xénon sur une surface de nickel.

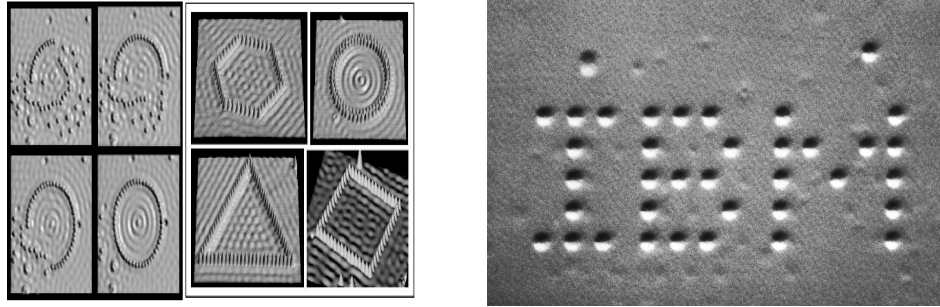


FIGURE 3 – Manipulation atomique par STM : à gauche, schéma illustrant le déplacement d'atomes à l'aide de la pointe STM ; à droite, l'image emblématique "IBM" écrite en atomes de xénon sur une surface de nickel par des chercheurs d'IBM en 1990.

- **Étude des propriétés électroniques locales** : Le STM peut être utilisé pour cartographier la densité d'états électroniques localement à la surface d'un matériau, par la technique de spectroscopie tunnel (*scanning tunneling spectroscopy, STS*). Cette méthode permet d'analyser des propriétés quantiques telles que les niveaux d'énergie électroniques, les bandes interdites (gap), et les états localisés. Elle est particulièrement utile dans l'étude des matériaux supraconducteurs, semi-conducteurs ou des isolants topologiques.

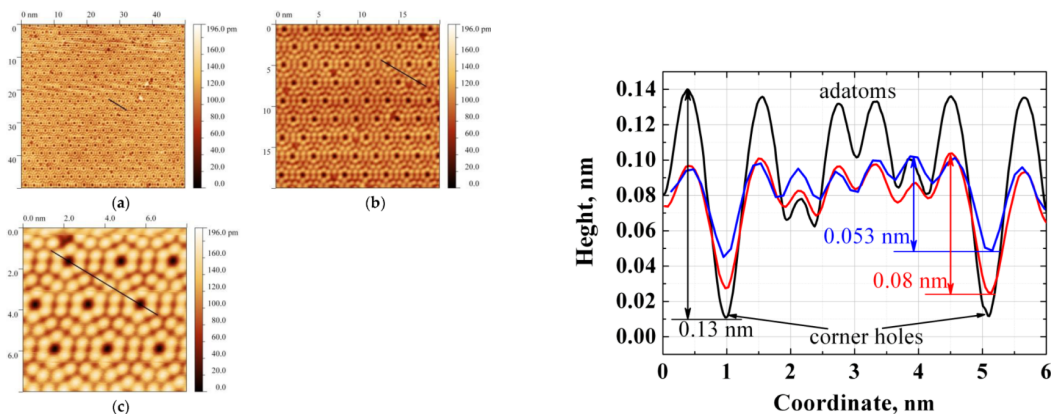


FIGURE 4 – Spectroscopie tunnel : cartographie de la densité d'états électroniques locaux.

- **Observation de phénomènes quantiques collectifs** : Le STM permet d'observer des phénomènes tels que les ondes de Friedel, les résonances de Kondo, ou encore les effets quantiques de confinement comme ceux observés dans le célèbre "corrallé quantique", où des atomes disposés en cercle sur une surface métallique enferment des électrons de surface, créant des motifs d'interférence quantique.

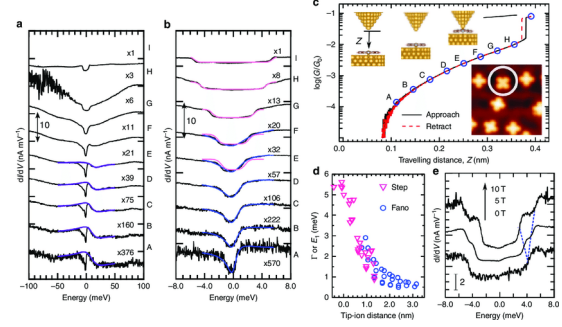
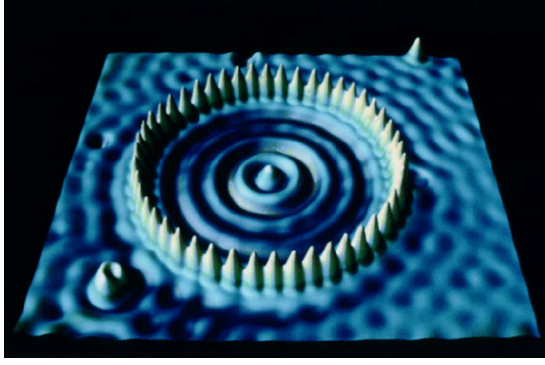


FIGURE 5 – À gauche : Corral quantique, interférences électroniques dans un anneau d’atomes. À droite : Transition Fano-Kondo induite par l’approche STM d’un ion Fe^{2+} .

- **Caractérisation de matériaux 2D** : Le STM est largement utilisé dans l’étude de matériaux bidimensionnels tels que le graphène ou le dichalcogénure de molybdène (MoS_2), en révélant leur structure atomique, leurs défauts, et leurs propriétés électroniques locales. Il joue un rôle crucial dans la recherche sur les dispositifs électroniques ultraminces.

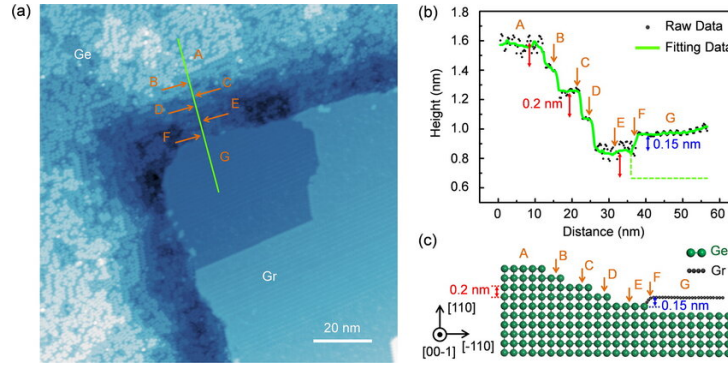


FIGURE 6 – Image STM du graphène montrant la structure hexagonale.

6 Conclusion et perspectives

Le microscope à effet tunnel (STM) a révolutionné la science des surfaces en permettant la visualisation directe, à l’échelle atomique, de la matière. Grâce à son principe fondé sur l’effet tunnel quantique, il offre non seulement des images d’une résolution inégalée, mais aussi la capacité de manipuler atomes et molécules avec une précision sans précédent.

Aujourd’hui, le STM est au cœur de domaines de recherche avancés, tels que la caractérisation des matériaux bidimensionnels (graphène, dichalcogénures de métaux de transition) et l’étude de phénomènes quantiques complexes (états de Kondo, supraconductivité à haute température).

6.1 Perspectives d’évolution

Les développements technologiques récents ouvrent de nouveaux horizons :

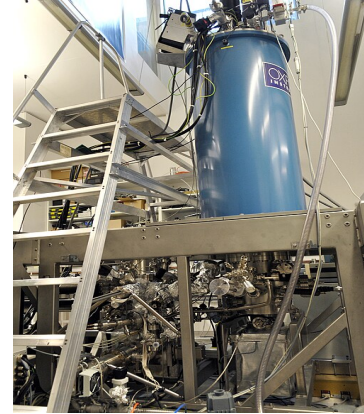
- **Couplage STM-spectroscopie** : associer le STM à des techniques spectroscopiques (optique, photoémission) pour sonder simultanément la structure et les propriétés électroniques.
- **STM à température cryogénique et ultra-haut vide** : améliorer la stabilité pour explorer des états électroniques exotiques à très basse température.

- **STM combiné à la microscopie à force atomique (AFM)** : pour obtenir à la fois la topographie atomique et les forces d'interaction locales.
- **Fabrication d'architectures atomiques sur mesure** : construire des dispositifs quantiques atomiques pour l'information quantique et le stockage de données.

6.2 Impact scientifique

Au-delà de ses performances actuelles, le STM incarne une approche radicale de la matière : observer, comprendre, et manipuler les propriétés fondamentales des surfaces à l'échelle atomique. Il a transformé :

- La validation expérimentale des théories quantiques de surface,
- La conception de nanostructures fonctionnelles,
- La compréhension des interactions à l'échelle atomique,
- Le développement de technologies émergentes basées sur le contrôle quantique de la matière.



En résumé : Le STM n'est pas seulement un outil d'observation ; il est devenu un acteur clé de la création à l'échelle atomique. Ses évolutions futures, en synergie avec d'autres techniques avancées, ouvrent la voie à une ingénierie contrôlée de la matière pour les sciences quantiques et la nanotechnologie de demain.

Références

- [1] Chapelon, F., *Analyse et technologie des surfaces*, Hermes Science Publications, 2000. Disponible sur : https://www.google.es/books/edition/Analyse_et_technologie_des_surfaces/5DdQUZoX6qYC?hl=es&gbpv=1
- [2] Chen, C. J., *Introduction à la microscopie à effet tunnel*, Oxford University Press (2007).
- [3] Delgado-Jimenez, L., Chacon-Vargas, S., Sabater-Piqueres, C., et Saenz-Arce, G., “Mesures topographiques sur des surfaces atomiquement planes dans des conditions ambiantes à l’aide d’un microscope à effet tunnel : une approche didactique,” *Uniciencia* [en ligne], vol. 33, n°1, pp. 30–42, 2019. [Consulté le 24 avril 2025]. Disponible sur : http://www.scielo.sa.cr/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S2215-34702019000100030&lng=en&nrm=iso. DOI : <http://dx.doi.org/10.15359/ru.33-1.3>.
- [4] Eigler, D. M. et Schweizer, E. K., “Positionnement d’atomes uniques avec un microscope à effet tunnel,” *Nature*, 344, 524–526 (1990).
- [5] Eigler, D. M., “STM : Single Atom/Molecule Manipulation and Its Application to Nanoscience and Technology,” [en ligne], 2000. Disponible sur : https://www.researchgate.net/publication/1882935_STM_Single_AtomMolecule_Manipulation_and_Its_Application_to_Nanoscience_and_Technology
- [6] Fischer, Ø., “Spectroscopie à effet tunnel des supraconducteurs à haute température,” *Reviews of Modern Physics*, 79, 353–419 (2007).
- [7] Image STM : “Topographie d’une surface de carbure de silicium,” [en ligne]. Disponible sur : https://www.researchgate.net/figure/Topographie-dune-surface-de-carbure-de-silicium-44-nm-2-Chaque-tache-correspond-a_fig1_30518818
- [8] Griffiths, D. J., *Introduction à la mécanique quantique*, 2e édition, Pearson (2005).
- [9] Kittel, C., *Introduction à la physique de l’état solide*, 8e édition, Wiley (2005).
- [10] Takahashi, K., et al., “Simulation expérimentale de Kondo avec l’approche d’une pointe STM,” [en ligne], 2018. Disponible sur : https://www.researchgate.net/figure/Experimental-Kondo-simulation-with-approaching-an-STM-tip-a-b-Evolutions-of_fig2_318184937.
- [11] Gimzewski, J. K. et al., “STM and beyond : techniques and applications in molecular nanoscience,” *Chemical Society Reviews*, 2015. Disponible sur : <https://pubs.rsc.org/en/content/articlepdf/2015/cs/c4cs00204k>.
- [12] Meyer, G. et al., *Scanning Probe Microscopy : The Lab on a Tip*, Springer (2006). Disponible sur : https://books.google.es/books?id=2e5TssyiJboC&printsec=frontcover&hl=es&source=gbs_ViewAPI.
- [13] Schulz, F., Ijäs, M., Drost, R., Hämäläinen, S. K., Harju, A., Seitsonen, A. P., et Liljeroth, P., “Transitions à plusieurs corps dans une seule molécule visualisées par microscopie à effet tunnel,” *Nature Physics*, vol. 11, pp. 229–234, 2015. Disponible sur : <https://www.nature.com/articles/nphys3212>.
- [14] Sorbonne Université, “Microscopie à effet tunnel (STM),” [fiche pédagogique en ligne]. Disponible sur : <https://fc.sorbonne-universite.fr/pdf/fiche/?ID=6206>.
- [15] Tersoff, J. et Hamann, D. R., “Théorie du microscope à effet tunnel,” *Physical Review B*, 31, 805–813 (1985).
- [16] Tsai, J. S., “Résolution atomique du MET sur le graphite,” *Journal of Vacuum Science & Technology A*, 8, 349–352 (1990).