

Modello semplificato effetto tunnel

- Modello unidimensionale potenziale $V(z)$
in meccanica classica un elettrone di energia E che si muove in una regione di potenziale $V(z)$ è descritto dall'eq.:

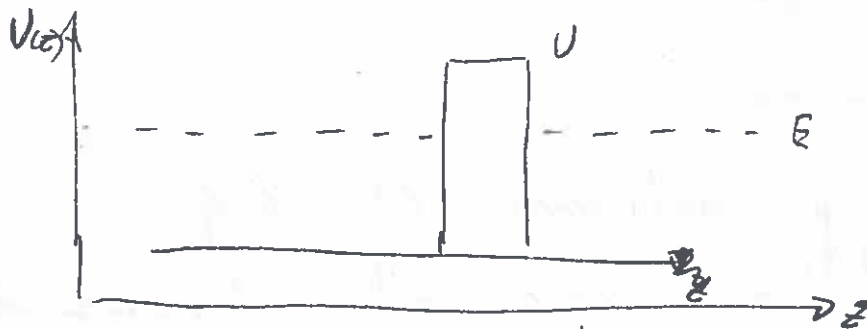
$$\frac{p_z^2}{2m} + V(z) = E$$

- Le regioni $E < V(z)$ sono classicamente proibite

- Meccanica quantistica lo stato dell'elettrone è descritto dalla f.d.o. $\Psi(z)$ soluzione di:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} \Psi(z) + V(z) \Psi(z) = E \Psi(z)$$

Considerando un potenziale barriera:



Nella regione classicamente permessa ($V(z) \leq E$):

$$\Psi(z) = \Psi_0 e^{\pm i k z} \quad k = \frac{\sqrt{2m(E-U)}}{\hbar}$$

Nella regione $V(z) > E$

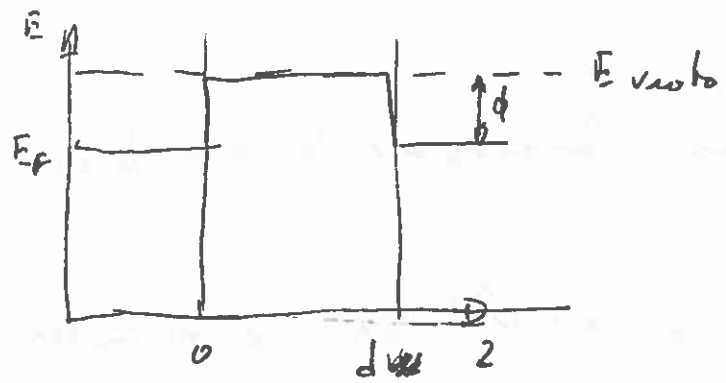
$$\Psi(z) = \Psi_0 e^{\pm k z} \quad k = \frac{\sqrt{2m(U-E)}}{\hbar}$$

escludo $\Psi_0 e^{+kz}$ perché cresce all'interno della barriera

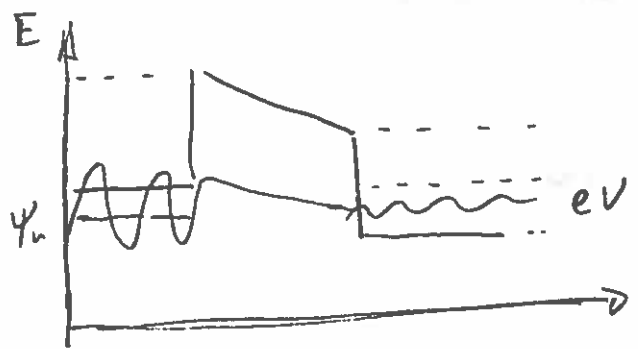
Esiste una probabilità finita che l'elettrone possa attraversare la barriera

- Considero il caso di due metalli separati dal vuoto.

Per semplicità $\phi_1 = \phi_2$



Se la ddp tra i due metalli = 0 non c'è tunneling



Applicando V tra gli elettrodi $eV \ll \phi$ probabilità che elettrone nello stato Ψ_n attraversi la barriera:

$$W \propto |\Psi_n(0)|^2 e^{-2\kappa d}$$

$$\kappa = \frac{\sqrt{2m\phi}}{\hbar}$$

$$\kappa = 0.51 \sqrt{\phi [\text{eV}]} \text{ \AA}^{-1}$$

La corrente di tunneling dipende dal numero di stati elettronici Ψ_n con nella regione eV:

$$I \propto \sum_{E_n = E_F - eV}^{E_F} |\Psi_n(0)|^2 e^{-2\kappa d}$$

Se V piccolo

$$I \propto P_S(\bar{E}_F, \bar{E}_F)$$

$$P_S(z, E) \equiv \frac{1}{E} \sum_{E_n = E - \delta}^E |\Psi_n(z)|^2 \quad \text{per } \epsilon \rightarrow 0$$

quindi:

$$I \propto V P_S(0, \bar{E}_F) e^{-2\kappa d} \approx V P_S(0, \bar{E}_F) e^{-1.02 \sqrt{\phi} d}$$

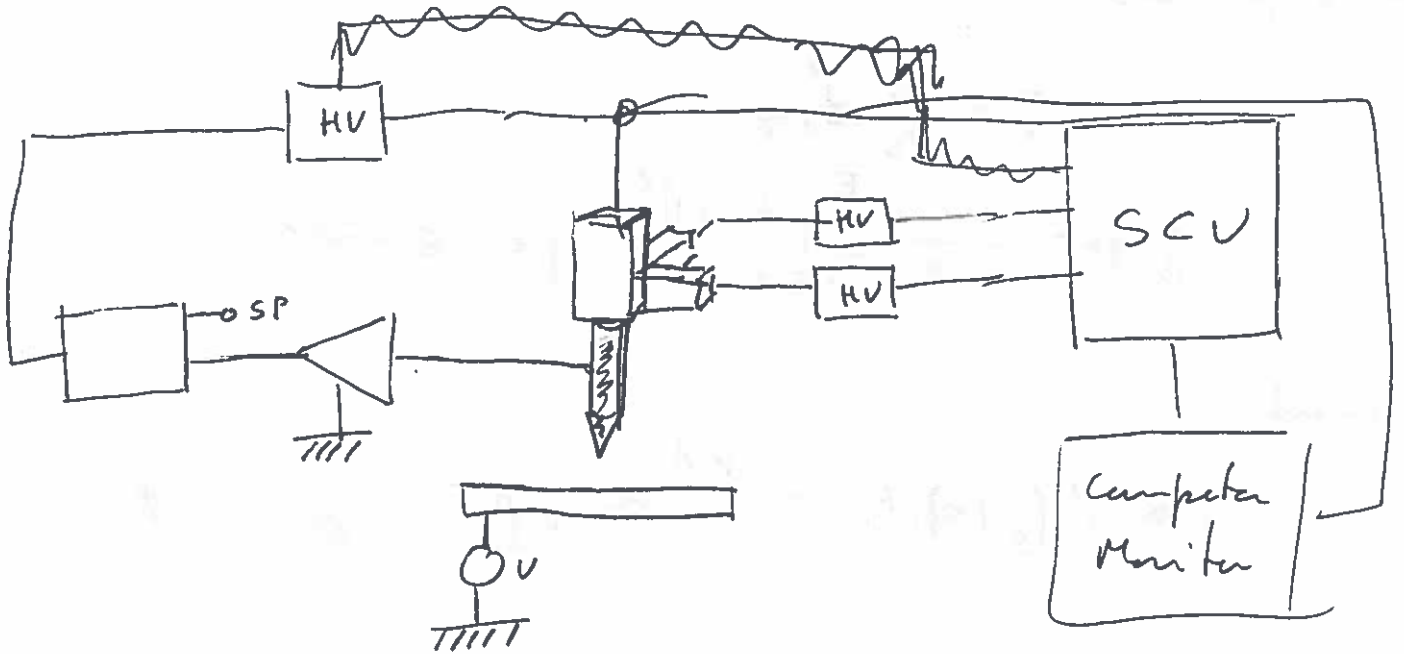
Se considero $\phi \sim 4 \text{ eV}$ I decade e^2 volte per \AA di separazione.

Aspetti sperimentali del fenomeno di tunneling

- Stabilità degli elettrodi
- Esperimenti con giunzioni M-ox-M
- Negli anni '70 prime osservazioni effetto tunnel in vuoto
- 1983 Binnig e Rohrer STM

Principio funzionamento STM

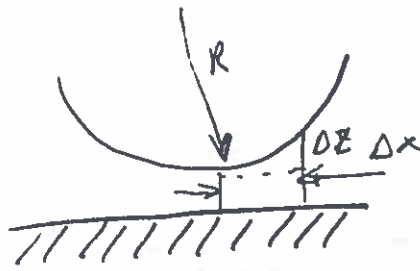
12.0 12



- Punta - Campion tunneling
- Controllo posizione scanner piezoelettrici
spiegazione materiali piezoelettrici
- Spiegazione su come funziona la scansione
- Importanza della dipendenza esponenziale della corrente dalla distanza

211 ma risoluzione laterale STM

Approssimo punta sferica di raggio R



$$I(\Delta x) = I_0 \exp \left[-2K \frac{\Delta x^2}{2R} \right] \quad K \sim 1 \text{ \AA}^{-1}$$

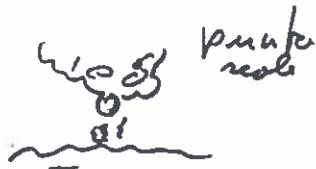
Caso $R = 100 \text{ nm} = 1000 \text{ \AA}$

$$I = I_0 e^{-2} \quad \text{per } \Delta x \sim 45 \text{ \AA}$$

Caso $R = 10 \text{ nm} = 100 \text{ \AA}$

$$I = I_0 e^{-2} \quad \text{per } \Delta x \sim 14 \text{ \AA}$$

- - caso reale la risoluzione è migliore $\sim 1:2 \text{ \AA}$

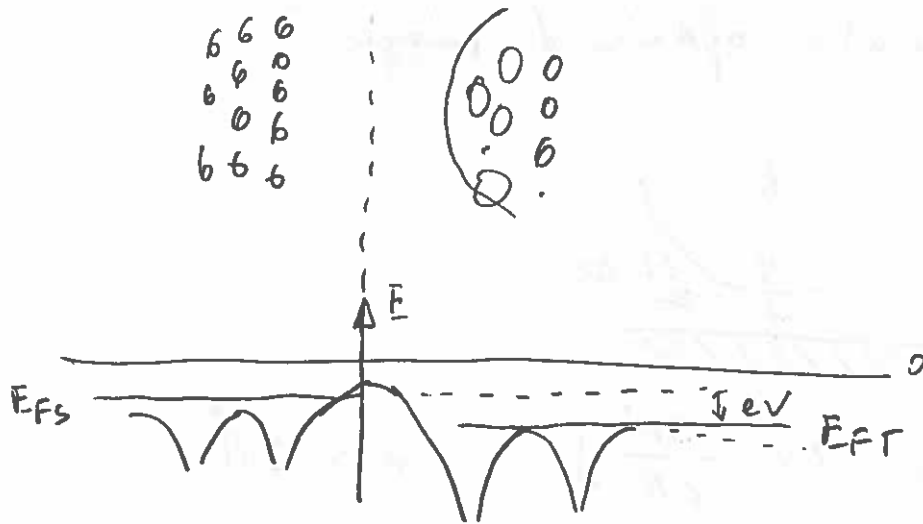


Singolo atomo di un cluster agisce da punta

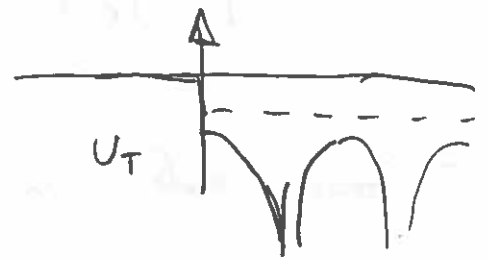
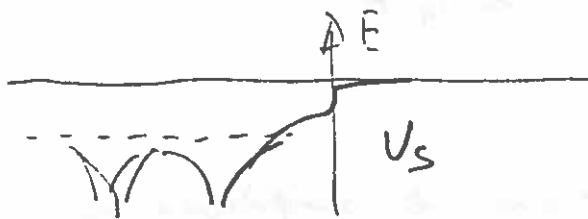
Elemento di matrice di tunneling

⇒ calcolo del rate di transizione tra il campione e la punta → approccio perturbativo

Sistema combinato punta - campione



- punta campione vicini il potenziale U nella regione della barriera viene modificato
- considero separatamente punta e campione



- per $t < 0$ considero $U_T = 0$

$$(T + U_s) \Psi_{pe} = E_{pe} \Psi_{pe}$$

$t > 0$ §

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = (T + U_s + U_T) \Psi$$

Espando Ψ nelle f.d.o. della punta

$$(T + U_T) \chi_v = E_v \chi_v$$

$$t=0 \quad \bar{\Psi} = \Psi_\mu$$

u.t.o (1)

$$\Psi = \Psi_\mu e^{-i\bar{E}_\mu t/\hbar} + \sum_\nu c_\nu(t) \chi_\nu e^{-iE_\nu t/\hbar}$$

⇒ probabilità di transizione tra Ψ_μ e χ_ν
Regola d'oro di Fermi

$$W_{\mu\nu} = \frac{2\pi}{\hbar} |M_{\mu\nu}|^2 \delta(E_\nu - E_\mu)$$

$$M = \int_{\Omega_T} \chi_\nu^* U_T \Psi_\mu d\tau$$

$$M_{\mu\nu} = \int_{\Omega_T} \Psi \chi_\nu^* U_T \Psi_\mu d\tau = \int_{\Omega_T} \chi_\nu^* (E_\nu - T) \Psi_\mu d\tau$$

poiché in $W_{\mu\nu}$ è presente $\delta(E_\nu - E_\mu)$
 $E_\nu = E_\mu$

$$M_{\mu\nu} = \int_{\Omega_T} (\chi_\nu^* E_\mu \Psi_\mu - \Psi_\mu T \chi_\nu^*) d\tau$$

nel volume della punta $U_S = 0$

$$M_{\mu\nu} = \int_{\Omega_T} (\chi_\nu^* T \Psi_\mu - \Psi_\mu T \chi_\nu^*) d\tau$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{\Sigma} (\chi_\nu^* \nabla \Psi_\mu - \Psi_\mu \nabla \chi_\nu^*) \cdot \hat{n} dS$$

$$I = \frac{4\pi e}{h} \int_{-\infty}^{\infty} [f(E_F - eV + \epsilon) - f(E_F + \epsilon)] \times$$

$$\times \rho_S(E_F - eV + \epsilon) \rho_T(E_F + \epsilon) |M|^2 d\epsilon$$

$k_B T \ll V$

$$I = \frac{4\pi e}{h} \int_0^{eV} \rho_S(E_F - eV + \epsilon) \rho_T(E_F + \epsilon) |M|^2 d\epsilon$$

$$I = I^{S \rightarrow T} - I^{T \rightarrow S} =$$

$$= \frac{4\pi e}{h} \left[\int_{-\infty}^{\infty} f(E_F - eV + \epsilon) \cdot (1 - f(E_F + \epsilon)) |M_{\nu\mu}|^2 - \right.$$

$$\left. - [(1 - f(E_F - eV + \epsilon)) f(E_F + \epsilon)] |M_{\nu\mu}|^2 \right] \rho_S(E_F - eV + \epsilon)$$

$$\rho_T(E_F + \epsilon) d\epsilon$$

$$I = \frac{4\pi e}{h} \int_0^{eV} [f(E_F - eV + \epsilon) - f(E_F + \epsilon)] \rho_S \rho_T d\epsilon$$

$k_B T \ll V$

$$I = \frac{4\pi e}{h} \int_0^{eV} \rho_S(E_F - eV + \epsilon) \rho_T(E_F + \epsilon) d\epsilon |M_{\nu\mu}|^2 d\epsilon$$

$$I = \frac{4\pi e}{h} \left[\int_{-\infty}^{eV} f(E_F - eV + \epsilon) (1 - f(E_F + \epsilon)) |M_{\nu\mu}|^2 - \right. \\ \left. - \int_{eV}^{\infty} (1 - f(E_F - eV + \epsilon)) f(E_F + \epsilon) |M_{\nu\mu}|^2 \right] \delta(E_\mu - E_\nu - eV) d\epsilon \\ = \frac{4\pi e}{h} \int_0^{eV} d\epsilon [f(E_F - eV + \epsilon) - f(E_F + \epsilon)] |M_{\nu\mu}|^2 \delta(E_\mu - E_\nu - eV)$$

Assumo punta sferica.



funzioni d'onda punta a simmetria sferica (S)

$$I \propto \int_0^{eV} |\psi_\nu(r_0)|^2 \delta(E_\nu - E_\mu - \epsilon) d\epsilon$$

- considerazioni sul significato di risoluzione atomica
- spettroscopia

$$\frac{\partial I}{\partial V} \propto \left| \psi_{E_F + V}(r_0) \right|^2 = f(E)$$

Considerazioni sperimentali:

- Vibrazioni isolamento
- Sistema di avvicinamento
- preparazione punta

