

LP41 - Effet Tunnel

Retour jury: Encore une fois, il ne s'agit pas de se limiter à des calculs. L'exposé doit présenter l'analyse d'applications pertinentes. Trop de candidats pensent que l'effet tunnel est spécifique à la physique quantique. Dans le traitement de l'effet tunnel, les candidats perdent souvent trop de temps dans les calculs. Le jury invite les candidats à réfléchir à une présentation à la fois complète et concise sans oublier les commentaires physiques relatifs à la dérivation de la probabilité de transmission. Certains candidats choisissent d'aborder le cas de la désintégration alpha mais ne détaillent malheureusement pas le lien entre la probabilité de traversée d'une barrière et la durée de demi-vie de l'élément considéré. La justification des conditions aux limites est essentielle ! Le microscope à effet tunnel peut être un bon exemple d'application s'il est analysé avec soin (hauteur de la barrière, origine de la résolution transverse,...). Une justification physique des conditions aux limites adoptées est attendue. Il est important de justifier les relations de continuité aux interfaces. Ces leçons conduisent parfois à des calculs très lourds. Afin de les minimiser, dans cette leçon, on pourra utiliser des considérations de symétrie. Si les détails des calculs peuvent être omis, les bases de ceux-ci, ainsi que la signification physique des conditions aux limites imposées au système doivent être explicitées. Par ailleurs, le jury attend la présentation d'applications significatives et bien comprises. Il existe, pour l'effet tunnel, d'autres applications que la microscopie et l'émission α : il y en a aussi en physique de la matière condensée (les diodes tunnel, les super-réseaux, l'effet Josephson . . .).

Niveau : CPGE (PC/PC*) /Licence 3

Pré-requis: Notion de fonction d'onde, Équation de Schrodinger, courant de probabilité, Radioactivité (Lycée)

Bibliographie:

[1] Sanz. J'intègre PC/PC* . Dunod

[2] Mécanique quantique, tome I, C. Cohen-Tannoudji

[3] Effet tunnel : quelques applications, BUP 734, mai 1991, C. Matta

[4] Le microscope à effet tunnel, BUP 699, décembre 1987, B. Leroy

[5] 15 leçons de mécanique quantique - Basdevant

[6] Quantique : fondement et application - Pérez

Jean-Louis BASDEVANT. Mécanique quantique. Éd. de l'École polytechnique, 2001

Plan PH Suet

<http://www.enit.rnu.tn/fr/Minds/quant/amphi6MQ.pdf>

Introduction

Nous allons ici étudier un des effets de mécanique quantique qui va à l'encontre de la mécanique classique : l'effet tunnel. Lors de l'étude du puits fini, on a vu que la fonction d'onde pouvait pénétrer dans les bords du puits. Si ceux-ci sont de profondeur finie, on peut imaginer que la fonction d'onde les traverse et soit de nouveau propagative après : c'est l'effet tunnel. Cet effet est très important, et on ne peut en surestimer l'importance dans les applications de la mécanique quantique à diverses situations physiques. L'effet Tunnel fut prédit dès le début de la mécanique quantique, et mis en évidence dès la fin des années 30 pour expliquer différents phénomènes (Fowler/Nordheim 1928 pour l'extraction d'électrons

d'un métal sous l'effet d'un champ électrique fort, Gamow 1928 pour la radioactivité, Frenkel 1930 sur la résistance de contact entre deux matériaux conducteurs).

I - L'effet Tunnel

[5][6][1]

1) Position du problème

-Onde plane de particule quantique (d'énergie purement cinétique $E=p^2/2m < V$) face à une barrière carrée de potentiel V et d'épaisseur l + équation de Schrodinger dans les 3 zones (ne pas faire les calculs). [1]

-Solution des équations, exprimer $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ et $q = \sqrt{2m(V-E)}/\hbar$

-4 Relation de continuité en $x=0$ et en $x=l$. [1]

-Explication de la continuité de la fonction d'onde (et de la dérivée) : ψ est continue et le saut de potentiel est de discontinuité finie donc $d\psi/dx$ est continue aussi. [2]

-Nous obtenons 4 équations pour 5 inconnues, il est donc toujours possibles d'exprimer 4 inconnues en fonction de la 5ème → pas de quantification de l'énergie ici (dû au fait que la particule quantique ne soit pas confinée). Contrairement au puit quantique fini à 4 équations/4 inconnus : énergie quantifié.

-Si l'énergie de la particule $E < V$ potentiel → impossibilité de traverser la barrière en classique. En quantique l'onde évanescente permet d'avoir une probabilité non nul de passer la barrière.

2) Probabilité de transmission

-Rappel définition vecteur densité courant de probabilité de présence : $\mathbf{j} = \mathbf{p}/m \cdot |\psi|^2$

-Définition des coefficient de transmission et de réflexion en courant de probabilité

$T = \frac{\|j_t\|}{\|j_i\|}$ [1].

Remarques:

-La probabilité de transmission n'est jamais nulle : une particule quantique a donc toujours la possibilité de traverser la barrière de potentiel → C'est l'effet Tunnel : existence d'ondes évanescentes dans la barrière de potentiel.

- $R+T=1$: conservation de la probabilité de présence → analogie avec l'électromagnétisme : conservation de l'énergie!

-Représentation de la densité de probabilité de présence de la fonction d'onde avec détails des 3 zones: (dvlp calculs si besoin :

https://perso.ensta-paris.fr/~perez/Enseignement/ENSTA/PC_PA101/corr_PC3.pdf)

Zone I : phénomène d'interférence spatiale dû à la superposition de l'onde incidente et de l'onde réfléchi. Distance séparant deux maximums = $\lambda_{dB}/2$

Zone II : Décroissance exponentielle sur une distance caractéristique de $\delta = 1/q$
 $\delta = \hbar / \sqrt{2m(V-E)}$ → onde évanescente.

Zone III : Probabilité de présence uniforme

A savoir : Le courant de probabilité associé à une onde évanescente est nul. Dans le cas présent on a tout de même un courant sous la barrière car lors du calcul du courant le terme

croisé entre l'onde évanescente et l'onde anti-évanescente donne une contribution non nulle.

3) Approximation de la barrière épaisse

-Faire l'approximation proprement [1], on voit que la probabilité de présence décroît de manière exponentielle lorsque l augmente.

A savoir: Dans le développement du \sinh on a un terme $\exp(-l/\delta)$ correspondant au rebond de la particule sur le 2ème bord du mur dans la zone II.

-Donner des ordres de grandeur (en prenant $E=V/2$, voir Sanz PC/PC* page 1205) → Effet uniquement présent aux très faibles échelles de masse et d'énergie.

Pour avoir une forte probabilité il faut:

- une faible amplitude de la barrière de potentiel
- une faible largeur de la barrière de potentiel
- une particule de petite masse

Exemples : électrons forte probabilité de transmission. Particules classiques petite probabilité de transmission.

-Faire application numérique: <http://romain.bel.free.fr/agregation/Lecons/LP61.pdf>

Transition : Cet effet n'est présent qu'aux très basses masses et énergies. On s'attend donc à ce qu'il soit surtout présent à l'échelle atomique : on va voir le cas de la radioactivité α .

II - La radioactivité α

[6] [3] L'explication de la radioactivité α constitua un succès historique majeur pour la mécanique quantique dont il constitua la première application au noyau atomique.

1) Résultats expérimentaux

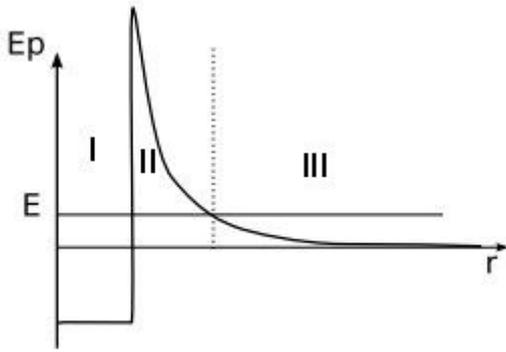
-Expliquer la radioactivité α (=noyau d'Hélium : 2 protons, 2 neutrons) : Pour des noyaux ayant un nombre de nucléons devenant trop important, la répulsion coulombienne entre protons prend des valeurs significatives par rapport à l'interaction forte qui assure la cohésion du noyau → Phénomène de saturation donnant lieu à la désintégration α . (Cas particulier de fission spontanée)

-Rappeler l'équation de désintégration.

-En 1911 Geiger et Nuttall en mesurant l'énergie cinétique d'expulsion des particules α trouvent une relation entre le temps de demi vie (entre 10^{-6} à 10^{18} s) de désintégration et l'énergie cinétique des particules : $\ln(\tau_{1/2}) = A + B/\sqrt{E}$, (loi empirique) on va voir qu'on peut expliquer cette formule à l'aide de l'effet tunnel.

2) Modèle de Gamow

En 1928 Gamow donne une explication quantique à la radioactivité α . Il approxime le noyau par un potentiel de la forme :



A l'intérieur du noyau de rayon R_0 la particule α qui est très stable va subir l'interaction forte des protons et des neutrons autour d'elle. Mais dès qu'elle sort du noyau, la particule chargée positivement va subir la répulsion électrostatique des $Z-2$ protons.

L'ordre de grandeur de l'amplitude de la barrière de potentiel du noyau est de 40 MeV. Mais les particules sortent du noyau avec des énergies de 4 à 9 meV (si inférieur à 4 la barrière est trop épaisse). Gamow pense immédiatement à l'effet tunnel : la particule α préexiste dans le noyau et cogne sur les "parois", elle a une probabilité non nulle de franchir la barrière de potentiel par effet tunnel.

On modélise le potentiel à franchir par la fonction $V(r) = Z_1 \cdot Z_2 \cdot e^2 / r = K/r$ pour $r > R_0$, sinon $V(r)=0$. (inspiré de l'interaction coulombienne d'un noyau à Z_2 protons et d'un particule à Z_1 protons).

L'approximation WKB (Wentzel, Kramers et Brillouin) permet une résolution approchée de l'équation de Schrödinger dans la limite semi classique pour calculer le coefficient T. Le but de cette approximation est de retrouver le régime classique lorsque l'on fait tendre \hbar vers 0. L'approximation de WKB correspond à l'ordre 1 pour \hbar .

En raccordant les solutions WKB propagatives et évanescentes, l'amplitude de transmission à travers la barrière tunnel est :

$$I_{\text{WKB}} \sim \exp -\frac{1}{\hbar} \int_a^b dx \sqrt{2m[V(x) - E]}$$

avec a et b la largeur de la barrière.

Validité :

$|d\lambda_{\text{dB}}/dx| \ll 1$ Cette condition nous indique que le potentiel doit varier sur une échelle de longueur plus grande que l'échelle caractérisant les oscillation de la fonction d'onde (hypothèse adiabatique).

En bref: On approche le potentiel par une succession de barrière rectangulaire élémentaire d'épaisseur dr et hauteur $V(r)$ si le potentiel diminue lentement sur une distance de l'ordre de la longueur d'onde.

$$T=t^2$$

en passant en logarithme on a:

$$\ln T = -2 \int_{r_0}^{\infty} \frac{\sqrt{2m(V(r)-E)}}{\hbar} dr = \frac{4\sqrt{K}}{\hbar} (2mr_0) - \frac{K\pi\sqrt{2m}}{\hbar} \frac{1}{\sqrt{E}} = a + \frac{b}{\sqrt{E}}$$

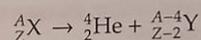
Or on estime que le temps entre 2 collisions est t_0 , elle a une chance de sortir à chaque rebond. La particule sort au bout d'un temps moyen $t_m = t_0/T$. Or le temps de demi-vie théorique est $t_{1/2} = \ln(2) \cdot t_m$. Donc $t_{1/2} = t_0 \cdot \ln(2)/T$

On retrouve la loi de Gamow-Condon-Gurney qui lie la durée de vie d'un noyau radioactif à l'énergie des particules qu'il émet. Cette formule corroborant bien les résultats expérimentaux.

Explication plus simple dans Quantique : fondements et applications de Pérez.

IV.1 Radioactivité α

Rappelons que la radioactivité α est l'émission de noyaux d'hélium 4, appelés particules α ou hélions, par des noyaux atomiques lourds ($Z > 82$), selon la réaction :



A désignant le nombre de nucléons du noyau et Z le nombre de protons. Elle fut interprétée par le physicien américain d'origine russe, George Gamow, en 1928, dans son travail de thèse, grâce précisément à l'effet tunnel.

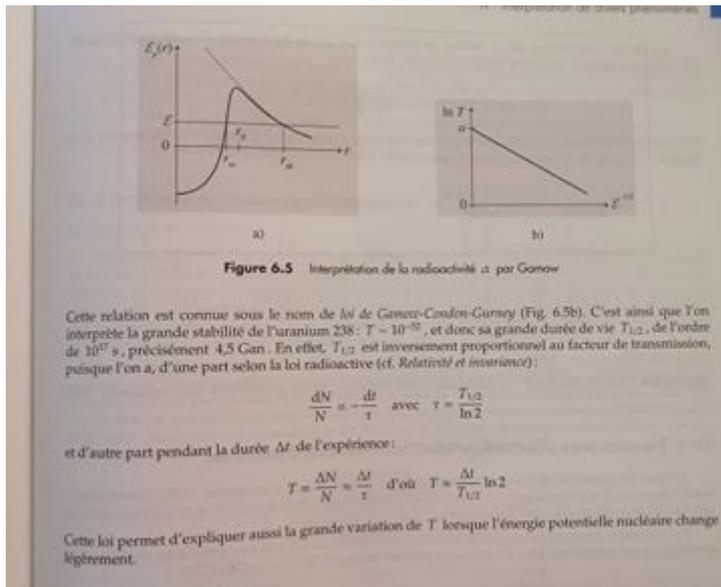
L'énergie potentielle d'interaction entre l'hélium et le reste du noyau est une fonction de la distance r qui les sépare. Pour les grandes valeurs de r , cette fonction $\mathcal{E}_p(r)$ présente un profil coulombien en $1/r$, puisque l'interaction est uniquement de nature électrostatique répulsive entre l'hélium, de charge $2e$, et le reste du noyau de charge positive $Z - 2e$. En revanche, pour les faibles valeurs de r , $\mathcal{E}_p(r)$ est un puits d'énergie potentielle (Fig. 6.5a).

Pour l'uranium 238, on évalue la valeur maximale de l'interaction nucléaire $\mathcal{E}_p(r)$ à environ 30 MeV si $r = r_0 \sim 3,5$ fm, alors que la mesure de l'énergie \mathcal{E} des hélions, émis par ce noyau, donne sensiblement 4 MeV. L'interprétation de l'émission radioactive relève donc bien de l'effet tunnel. Les résultats sur le facteur de transmission tunnel T , établis précédemment, doivent être adaptés puisque la barrière a un profil qui n'est pas rectangulaire. En admettant localement l'approximation de la barrière épaisse, et l'approximation WKB (de Gregor Wentzel, Hendrik Kramers et Léon Brillouin) pour laquelle λ_{DB} varie faiblement lorsque l'énergie potentielle change, on trouve :

$$\ln T = -2 \int_{r_m}^{r_M} \alpha_2 dr$$

r_m et r_M étant les valeurs extrêmes de r pour lesquelles l'énergie \mathcal{E} est égale à l'énergie potentielle coulombienne. On retrouve alors la loi expérimentale suivante qui donne $\ln T$ en fonction de \mathcal{E} (cf. Exercices) :

$$\ln T = a + \frac{b}{\mathcal{E}^{1/2}}$$



III - Le microscope à effet tunnel

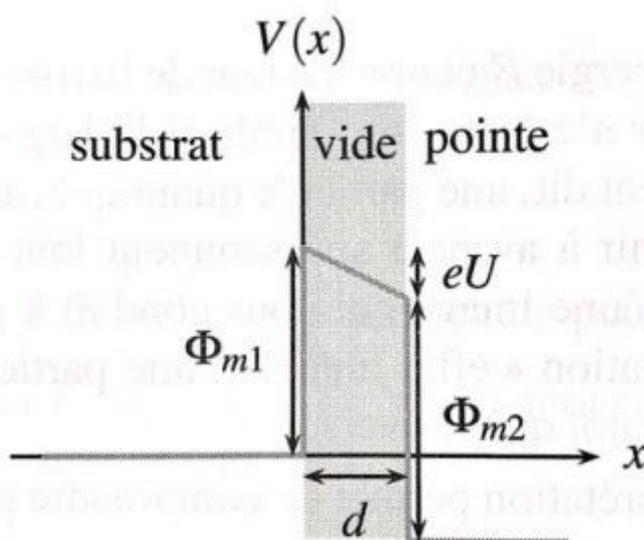
[1],[4],[5],[6] Prix Nobel 1986 (Mis au point en 1985 par Binnig et Rohrer).

1) Fonctionnement

-Schéma du microscope

-Une différence de potentiel est appliquée entre la pointe et le substrat conducteur, un courant apparaît lorsque la pointe est assez proche du matériau. De ce courant, il est possible de mesurer des distances. Le matériau étudié doit donc être conducteur et l'expérience doit se faire sous vide: La mécanique classique nous dit que nous avons une rupture du substrat, il n'y aura donc pas de circulation de courant dans le dispositif. Cependant, si nous plaçons un ampèremètre sur le circuit, nous constaterons que des charges circulent, il faut alors faire appel à la mécanique quantique pour modéliser le phénomène.

-Potentiel entre la pointe et le substrat :



Barrière trapézoïdale obtenue par l'application d'une différence de potentiel entre 2 extrémités de la barrière simple.

$\Phi_{\text{m\u00e9tal}}$ est de l'ordre de 4eV \rightarrow distance caract\u00e9ristique δ de l'ordre de 10\u00c5 : n\u00e9cessit\u00e9 d'approcher la pointe \u00e0 moins de $d=10\text{\u00c5}$ pour obtenir un courant. Ce courant est proportionnel \u00e0 la probabilit\u00e9 de transmission : $I = I_0 \cdot \exp(-2d/\delta)$.

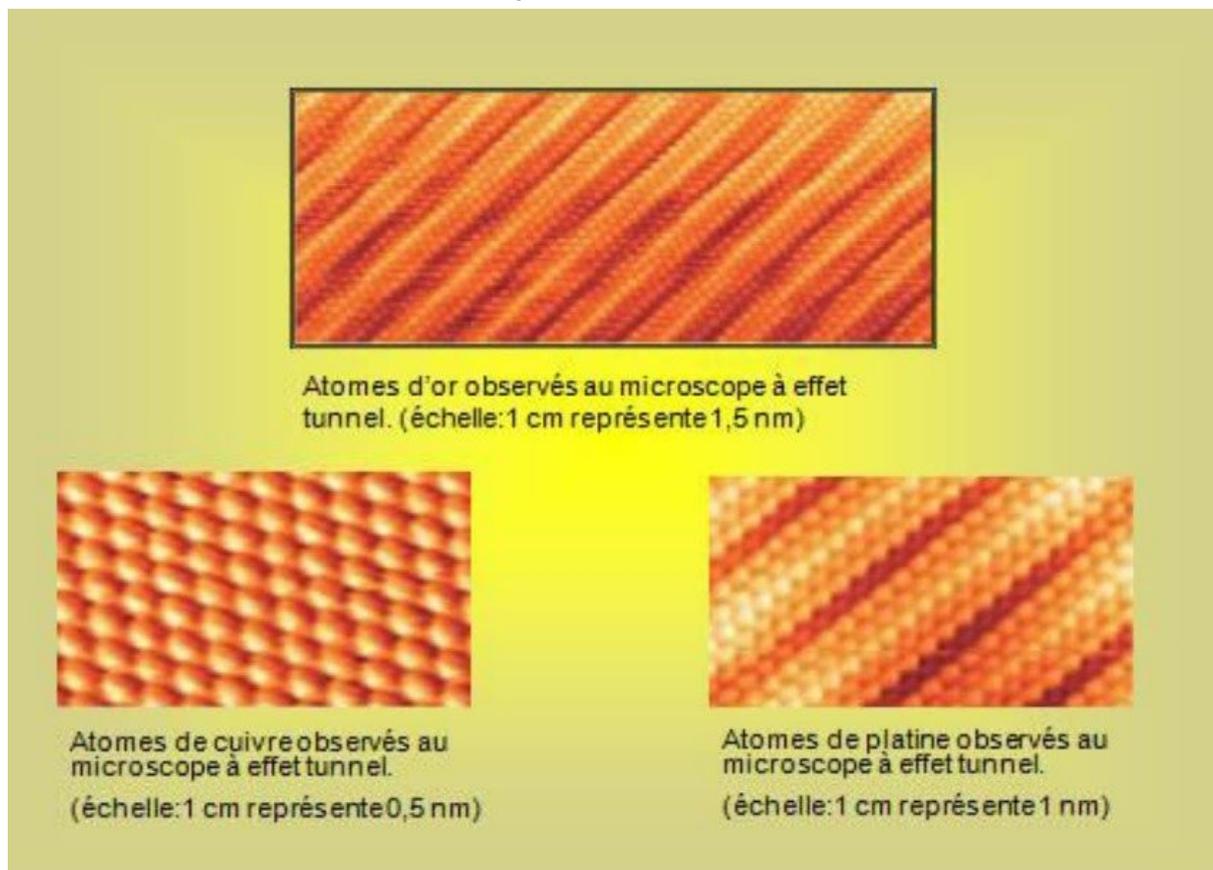
2) R\u00e9solution

Pour avoir une r\u00e9solution permettant d'\u00e9tudier les atomes un par un il faut:

- une pointe tr\u00e8s fine (m\u00e9thode chimique pour avoir un seul atome en bout de pointe)
- \u00eatre capable de contr\u00f4ler des d\u00e9placements de la pointe \u00e0 0.1\u00c5 pr\u00e8s (trois quartz pi\u00e9zo\u00e9lectriques)
- \u00e9liminer les vibrations (mat\u00e9riaux tr\u00e8s rigides entre la pointe et le substrat, tout \u00e7a mont\u00e9 sur ressort).

80% des \u00e9lectrons passe par l'atome en bout de pointe, ce qui donne une r\u00e9solution lat\u00e9ral de 2\u00c5. La r\u00e9solution vertical est elle limit\u00e9e par la stabilit\u00e9 m\u00e9canique, elle est estim\u00e9e au mieux \u00e0 0.05\u00c5. Il est donc important d'avoir une pointe tr\u00e8s fine car elle limite la r\u00e9solution.

En fixant la tension et le courant constant en maintenant la pointe \u00e0 une distance d de la surface, il est possible d'obtenir la topographie de la surface du mat\u00e9riau dans l'alt\u00e9rer.



Conclusion

On a pu voir l'existence d'une probabilit\u00e9 de pr\u00e9sence non nulle au del\u00e0 de la barri\u00e8re de potentiel. L'effet tunnel existe \u00e0 l'\u00e9chelle mol\u00e9culaire aussi avec le retournement de la mol\u00e9cule d'ammoniac, atomique pour expliquer la liaison chimique, mais aussi \u00e9chelle nucl\u00e9aire comme on a pu le voir avec la radioactivit\u00e9 alpha. De nombreuses applications

utilisent ce phénomène : mémoire flash de nos clés USB, ou encore le microscope à effet tunnel que nous avons vu. Il s'agit en fait d'un phénomène analogue au phénomène de réflexion totale frustrée dans le cas de la réflexion d'une onde électromagnétique sur une feuille métallique d'épaisseur inférieure à l'épaisseur de peau déjà rencontrée en électromagnétisme.

Remarques:

- Probablement pas le temps en 30 min de faire les 2 applications!
- Autre application possible : étude d'un double puit symétrique (molécule d'ammoniac) : LC43, [1], <http://physique.unice.fr/sem6/2015-2016/PagesWeb/PT/Mecanique/Carre.html>
<https://cours.espci.fr/site.php?id=73&fileid=382>
- Ne pas hésiter à abuser des ODG, des AN car leçon très théoriques.
- Application sur la liaison dans leçons de mécanique quantique - Basdevant.
- Application effet Josephson dans Quantique : fondements et application - Pérez (et pleins d'autres applications)

Questions:

- Connaissez-vous des manifestations macroscopiques de phénomènes quantiques ? La supraconductivité : transition de phase électronique, effet Josephson, l'effet photoélectrique.
- Sur le calcul de la probabilité de transmission : comment convaincre un élève que la probabilité de transmission est le rapport des coefficients des deux ondes planes ? Analogie avec la physique des ondes.
- Comment justifier physiquement la continuité de la dérivée première de la fonction d'onde ? Il existe des solutions dans les zones interdites classiquement. Dans ce cas se pose la question des caractéristiques de la fonction d'onde à la frontière des puits et de la barrière. L'onde étant régie par l'équation de Schrödinger, qui s'exprime en fonction de la dérivée seconde de ψ , impose que ψ et ψ' soient continues en tout point, y compris à la frontière. Si ψ n'était pas continue, on ne pourrait pas calculer ψ' , et si ψ' n'était pas continue, ψ'' ne serait pas calculable. Donc, du fait de la forme de l'équation de Schrödinger, ψ' doit être continue dans l'intervalle de définition de ψ . Dans le cas d'un puits infini, de domaine de définition ψ se limite à l'intérieur du puits ($|x| < a/2$). Donc la condition de continuité ne tient plus en $\pm a/2$.
- Pourquoi chercher des solutions de l'équation de Schrödinger stationnaire ? On cherche toujours les solutions stationnaires car elles forment une base de toutes les solutions : toutes les solutions s'expriment comme des combinaisons linéaires des solutions

stationnaires : $\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \varphi_n(x) e^{-i\omega_n t}$. Elles sont indépendantes du temps si les potentiels le sont aussi.

- Comment peut-on interpréter l'effet tunnel avec les relations d'incertitude de Heisenberg temps-énergie ? On retrouve la longueur de pénétration de l'onde évanescente : $\Delta E \Delta t \geq \hbar/2$
Si on suppose l'énergie de la particule $E + \Delta E \geq V_0$, elle peut donc passer au dessus de la barrière avec la vitesse $v = \sqrt{\frac{2(E + \Delta E - V_0)}{m}}$. Or $\Delta t = \hbar/2\Delta E$, la particule quantique parcourt pendant cette durée $l = v \cdot \Delta t$. Cette longueur est maximale pour $\Delta E = 2(V_0 - E)$ et est la longueur de pénétration. Cette interprétation permet de comprendre pourquoi la probabilité de transmission, pour une particule donnée et une largeur de barrière donnée, diminue lorsque

la hauteur de la barrière augmente. Seule une fluctuation d'énergie importante permet à la particules de passer au dessus d'une barrière élevée.

-Sur le microscope à effet tunnel : comment se fait le déplacement de la pointe du microscope à effet tunnel ? À courant constant (ou à hauteur constante).

-Comment faire si on n'a pas une surface conductrice ? on utilise la microscopie à force atomique en exploitant l'interaction (répulsion/attraction) entre les atomes de la pointe et les atomes surfacique de l'échantillon.

-Fonctionnement mémoire flash clé USB..

<https://www.futura-sciences.com/tech/dossiers/informatique-stockage-donnees-informatique-s-105/page/5/https://www.futura-sciences.com/tech/dossiers/informatique-stockage-donnees-informatiques-105/page/5/>

-Expliquer pourquoi on fait l'approximation de barrière épaisse pour découper un potentiel quelconque, alors qu'on les fait tendre vers une épaisseur nulle ? Le coefficient de transmission total est le produit, en log on a une somme, et ainsi, au lieu d'utiliser la somme pour des subdivision infiniment fine, nous pouvons remplacer la somme des logarithmes par une intégrale.

-Quelles conséquences si on considère un puits de potentiel au lieu d'une barrière de potentiel ? Est-ce incohérent avec la mécanique classique ? L'énergie est quantifié, non c'est cohérent avec la mécanique classique.