

Document 1 : Effet tunnel

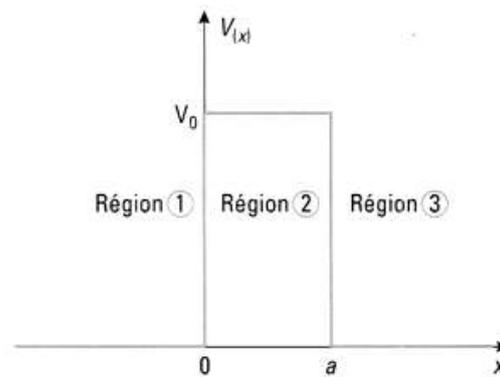
A. Approche qualitative de la barrière de potentiel

Considérons le cas « inverse » du chapitre précédent, représenté sur la figure ci-contre, d'une barrière de potentiel de hauteur V_0 et de largeur a sur laquelle arrive un système quantique d'énergie E .

L'image classique de ce type de situation physique est celle de l'alpiniste qui doit gravir une montagne. L'alpiniste doit fournir un effort contre le champ de pesanteur pour atteindre

le point d'altitude maximale puis dévaler la pente et retrouver l'altitude initiale mais de l'autre côté. Il faut évidemment distinguer deux cas suivant l'énergie dont l'alpiniste dispose pour produire l'effort initial et donc comparer la valeur de l'énergie du système à V_0 .

Si $E > V_0$, le système doit pouvoir franchir la barrière de potentiel, qu'il soit classique ou quantique. La mécanique quantique prévoit cependant qu'il y aura une onde réfléchi dans la région ① ce qui diffère notablement du cas classique. Pour caractériser le comportement du système au passage de la barrière, on définit des coefficients de réflexion R et de transmission T à partir des courants de densité de probabilité dans les régions ① et ③.



Définition 7

Coefficients de transmission et de réflexion

Le coefficient de réflexion est égal au rapport du courant réfléchi au courant incident :

$$R = j_{1x}^{\text{réfléchi}} / j_{1x}^{\text{incident}}$$

Le coefficient de transmission est égal au rapport du courant transmis au courant incident :

$$T = j_{2x} / j_{1x}^{\text{incident}}$$

Si $E < V_0$, la mécanique classique prévoit que le système ne peut pas franchir la barrière de potentiel. En effet, dans la région intermédiaire son énergie cinétique $E_c = E - V_0$ serait négative, ce qui n'est pas possible. L'alpiniste ne peut fournir l'effort nécessaire à l'ascension complète, il s'arrête au point où son énergie cinétique s'annule et rebrousse chemin. Dans le cas quantique la situation est différente. En effet, dans la région ② nous avons vu qu'il existe une solution sous forme d'onde évanescente. **La probabilité de présence est non nulle dans la région ②, classiquement interdite.** L'amplitude de l'onde évanescente décroît exponentiellement avec la distance x parcourue. Cette onde évanescente est caractérisée par une longueur de pénétration typique δ . Que se passe-t-il si cette longueur caractéristique est du même ordre de grandeur que l'épaisseur du potentiel ? On constate alors que la probabilité de retrouver le système de l'autre côté de la barrière n'est pas

nulle, c'est l'**effet tunnel**. On peut rattacher cette dénomination à l'image classique utilisée jusqu'ici : l'alpiniste a finalement creusé un tunnel pour franchir la montagne.

B. Calcul de la fonction d'onde et des coefficients R et T

Les fonctions d'onde s'écrivent dans chaque région sous la forme :

$$\phi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + A_1' e^{-ik_1 x} \quad \text{avec } A_1, A_1' \in \mathbb{C}$$

dans la région ①,

$$\phi_2(x) = A_2 e^{-\kappa x} + A_2' e^{\kappa x} \quad \text{avec } A_2, A_2' \in \mathbb{C}$$

dans la région ②, et :

$$\phi_3(x) = A_3 e^{ik_1 x} + A_3' e^{-ik_1 x} \quad \text{avec } A_3, A_3' \in \mathbb{C}$$

où l'on a utilisé : $k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ et $\kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$.

Si l'on suppose, comme dans le cas de la marche de potentiel, l'absence d'une onde retour dans la région ③, cela nous donne : $A_3' = 0$. Il reste donc 5 inconnues et 4 relations de passage : continuité de la fonction d'onde en $x = 0$ et en $x = a$, continuité de sa dérivée en $x = 0$ et en $x = a$. On peut donc exprimer les coefficients A_1' , A_2 , A_2' et A_3 en fonction de A_1 (voir Exercices).

Les densités de courant de probabilité s'expriment respectivement comme :

$$j_{1x} = \frac{\hbar k_1}{m} [|A_1|^2 - |A_1'|^2] = j_{1x}^{\text{incident}} - j_{1x}^{\text{réfléchi}}$$

$$j_{2x} = \frac{\hbar k_2}{m} [|A_2|^2 - |A_2'|^2] = j_{2x}^{\text{incident}} - j_{2x}^{\text{réfléchi}}$$

$$j_{3x} = \frac{\hbar k_3}{m} [|A_3|^2] = \frac{\hbar k_1}{m} [|A_3|^2]$$

Les coefficients R et T valent donc :

$$R = \frac{j_{1x}^{\text{réfléchi}}}{j_{1x}^{\text{incident}}} = \frac{|A_1'|^2}{|A_1|^2} = \frac{V_0^2 \sinh^2 \sqrt{2m(V_0 - E)} \frac{a}{\hbar}}{4E(V_0 - E) + V_0^2 \sinh^2 \sqrt{2m(V_0 - E)} \frac{a}{\hbar}}$$

$$T = \frac{j_{3x}}{j_{1x}^{\text{incident}}} = \frac{k_3 |A_3|^2}{k_1 |A_1|^2} = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2} = \frac{4E(V_0 - E)}{4E(V_0 - E) + V_0^2 \sinh^2 \sqrt{2m(V_0 - E)} \frac{a}{\hbar}}$$

On remarque en particulier que R et T satisfont la relation de conservation du courant de probabilité (équation de continuité) :

$$R + T = 1.$$

Application 3 Approximation de la barrière épaisse

Simplifier l'expression du coefficient de transmission T à travers une barrière de potentiel de largeur a et de hauteur V_0 , à la limite où $\kappa a \gg 1$. Calculer le coefficient de transmission d'un électron d'énergie 1 eV incident sur une barrière de potentiel de hauteur $V_0 = 2$ eV et de largeur $a = 1 \text{ \AA}$.

Solution

L'expression du coefficient de transmission T fait apparaître la fonction $\sinh^2 \kappa a = \sinh^2 \left(\sqrt{2m(V_0 - E)} \frac{a}{\hbar} \right)$ au dénominateur. A la limite $\kappa a \gg 1$ on a :

$$\sinh \kappa a \lim_{\kappa a \rightarrow \infty} \frac{e^{\kappa a} + e^{-\kappa a}}{2} \sim \frac{e^{\kappa a}}{2}.$$

L'expression de T se simplifie alors en :

$$T = \frac{4E(V_0 - E)}{4E(V_0 - E) + V_0^2 \sinh^2 \left(\sqrt{2m(V_0 - E)} \frac{a}{\hbar} \right)} = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \sinh^2 \left(\sqrt{2m(V_0 - E)} \frac{a}{\hbar} \right)}$$

$$\lim_{\kappa a \rightarrow \infty} \frac{1}{\frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \times \frac{1}{4} \times e^{2\sqrt{2m(V_0 - E)} \frac{a}{\hbar}}} = \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-2\sqrt{2m(V_0 - E)} \frac{a}{\hbar}}$$

T est donc une fonction exponentielle décroissante de portée $1/\kappa$ comme nous l'avons déjà vu dans le cas de la marche de potentiel. Pour un électron, de masse $m_e = 0,511 \text{ MeV}/c^2$, on détermine la valeur de cette dernière en Å selon :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\kappa} &= \frac{\hbar}{\sqrt{2m} \sqrt{(V_0 - E)}} = \frac{\hbar c}{\sqrt{2mc^2} \sqrt{(V_0 - E)}} \\ &= \frac{197 \cdot 10^6}{\sqrt{2 \times 511 \cdot 10^3} \sqrt{(V_0 - E)}} \times 10^{-5} = 1.95 \frac{1}{\sqrt{(V_0 - E)}}. \end{aligned}$$

On a utilisé pour ce calcul le produit $\hbar c = 197 \text{ MeV} \cdot \text{fm}$. Se reporter à l'exercice 1 pour un calcul détaillé. Ainsi pour une différence $V_0 - E = 1 \text{ eV}$, on trouve que le coefficient de transmission vaut : $T \approx 0,78$. Ainsi cet électron a une probabilité élevée de traverser la barrière de potentiel (80 %) alors que la mécanique classique prédit que la probabilité de franchissement est nulle.

L'application précédente permet de comprendre le pouvoir de résolution des **microscopes à effet tunnel** pour l'analyse des états de surface des matériaux. Une approche documentaire dédiée présente en détail le fonctionnement. Retenons simplement qu'une pointe de métal est placée à proximité de la surface du matériau. Les électrons qui peuvent franchir la distance d entre la pointe et la surface doivent « passer » par effet tunnel puisqu'ils sont liés à un atome. Ils doivent donc « vaincre » la barrière de potentiel qui les lie à l'atome. On mesure alors un courant électrique qui dépend de la probabilité de passage et donc de la distance d . La probabilité de passage diminue exponentiellement lorsque la distance augmente. Un système mécanique asservi de très grande précision ajuste alors en permanence la distance entre la surface et la pointe de manière à maintenir constante l'intensité du courant. Il suit donc la forme de la surface. On voit avec les valeurs numériques de l'application précédente que la distance caractéristique $1/\kappa$ est de l'ordre de grandeur de l'Angström, ce qui donne un ordre de grandeur du pouvoir de résolution de ces systèmes.

Document 2 : La radioactivité alpha (approche documentaire)

Texte :

Source : site **la radioactivité.com**¹¹

Le très grand âge des noyaux d'uranium et de thorium qui atteignent des milliards d'années témoigne que les désintégrations alpha se produisent difficilement,

11. http://www.laradioactivite.com/fr/site/pages/Effet_tunnel_Radioactivite_Alpha.htm

bien qu'elles libèrent des millions d'électronvolts d'énergie. Ces noyaux seraient parfaitement stables sans un mécanisme laborieux qui vient à bout des forces nucléaires et déclenche une désintégration. L'effet attractif de la colle nucléaire cesse brutalement hors du noyau. Si quatre nucléons, groupés en une particule alpha, arrivent à perdre le contact avec les autres nucléons, ce groupe ne ressent plus que la répulsion due à la charge électrique du reste du noyau. Il s'en éloigne alors de plus en plus vite pour acquérir l'énergie cinétique de quelques millions d'électronvolts dont il a été question. Le tout est d'arriver à perdre ce contact.

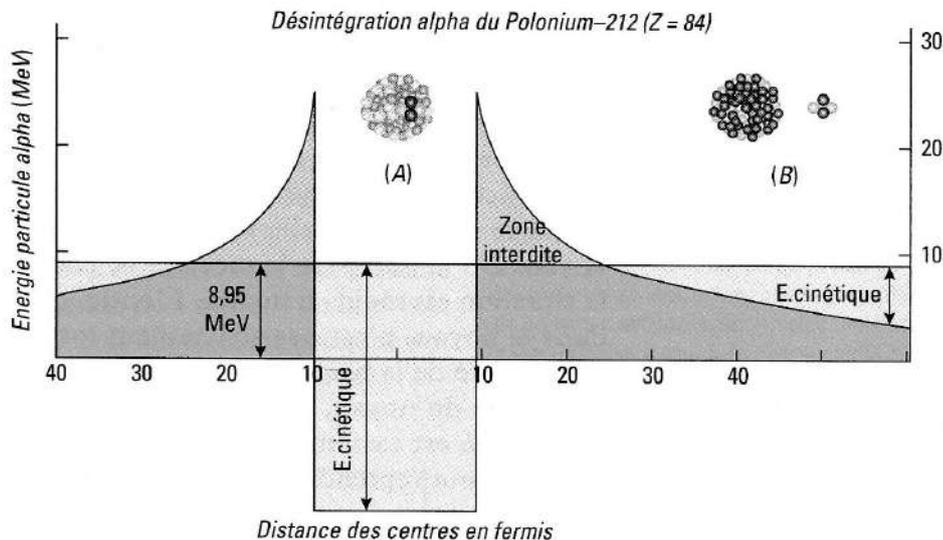


Fig 4. Un « puits » de potentiel... La désintégration alpha du Polonium-212 est celle qui dégage le plus d'énergie : 8,95 MeV. Cette désintégration est pourtant interdite par la mécanique classique. Il est impossible pour une particule alpha de passer de l'intérieur du noyau en A à l'extérieur en B. Elle se retrouve prisonnière au fond d'un « puits » comme le montre la courbe (en gris) qui représente l'énergie potentielle d'interaction entre la particule et le reste du noyau. Pour aller de A en B, la particule doit franchir une zone interdite où son énergie cinétique serait négative. Les zones permises sont le puits où l'attraction nucléaire prédomine, et l'extérieur du puits où la répulsion due à la charge du noyau l'emporte.

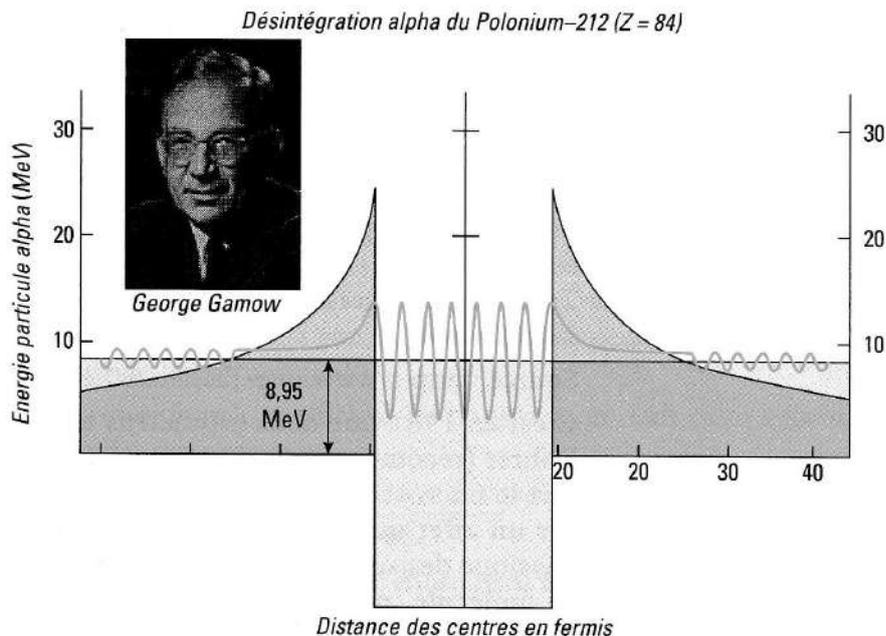


Fig 5. L'effet tunnel. L'onde associée à une particule alpha prisonnière à l'intérieur d'un noyau a été superposée à la figure précédente. On voit que l'onde déborde légèrement à l'extérieur du noyau, où l'amplitude des oscillations a été amplifiée pour les rendre visibles. Le carré de l'amplitude des oscillations représente, en mécanique quantique, la probabilité d'observer la particule en un endroit donné. Il existe donc une probabilité d'observer la particule alpha en dehors du noyau, c'est-à-dire une désintégration.

On doit à un physicien américain d'origine russe, George Gamow, la première explication de la désintégration alpha, une désintégration qui n'est pas autorisée par les lois de la physique classique. Le mécanisme proposé par Gamow a été appelé « effet tunnel ». Pour simplifier la présentation de l'effet tunnel, nous supposons que la particule alpha préexiste dans le noyau, comme le fit George Gamow à l'époque. L'effet tunnel est dû à ce qu'une particule se comporte à la fois comme un corpuscule et comme une onde dans le domaine de l'infiniment petit où la mécanique quantique se substitue à la mécanique classique.

La particule alpha se retrouve dans la situation d'un alpiniste, prisonnier d'un cratère, qui n'a plus de forces pour gagner le sommet, passer sur l'autre versant et dévaler vers la vallée. La barrière à franchir figure la compétition entre la colle nucléaire attractive et la répulsion électrostatique. La particule alpha ne peut pas franchir la barrière car elle ne possède pas l'énergie nécessaire : elle se trouve soit à l'intérieur, soit à l'extérieur du noyau. Du moins pour la mécanique classique. En mécanique quantique, la situation est moins tranchée. L'onde, qui représente une particule alpha dans le noyau, n'est pas strictement localisée et déborde légèrement de l'autre côté de la barrière. Il existe une probabilité d'observer la particule en dehors du noyau, là où la colle nucléaire ne se fait plus sentir. Cette probabilité est extrêmement petite, mais c'est elle qui permet la désintégration. Pour reprendre l'image de l'alpiniste, l'astuce dont il dispose pour gagner l'autre versant de la barrière montagneuse et trouver la liberté, est de creuser un tunnel à travers celle-ci. Une loi empirique veut que plus la barrière de potentiel est haute, plus l'épaisseur à traverser est importante et plus le noyau vit longtemps. Ceci explique certaines durées de vie particulièrement longues.

Questions :

- 1 – Commenter le fait qu'il soit nécessaire que le système se comporte à la fois comme une onde et comme un corpuscule pour que l'effet tunnel se produise.
- 2 – Pourquoi la durée de vie d'un noyau est-elle liée à l'« épaisseur » et à la « hauteur » de la barrière de potentiel ?
- 3 – Retrouver ces dépendances dans l'expression du coefficient de transmission.

Document 3 : La microscopie à effet tunnel (approche documentaire)

Texte : Le microscope à effet tunnel : un instrument quantique formidable

Source : <http://www.insp.jussieu.fr/Le-microscope-a-effet-tunnel-un.html>

C'est en 1981 que deux physiciens allemands, Gerd Binnig et Heinrich Rohrer (récompensés par le prix Nobel de physique en 1986), ont découvert le microscope à effet tunnel. Cet instrument est principalement basé sur un effet quantique : l'effet tunnel. De nos jours incontournable en physique des surfaces (étude des reconstructions de surface, spectroscopie de molécule, manipulation atomique et moléculaire), il permet à la fois l'imagerie d'une surface conductrice (topographie) et la mesure de ses propriétés électroniques (spectroscopie), plus précisément de sa densité d'états locale.

Le microscope à effet tunnel met à profit la nature ondulatoire de l'électron qui lui donne la possibilité de franchir une barrière tunnel, même lorsque

son énergie est inférieure à la hauteur de la barrière (fig. ci-contre). En effet, lorsque la barrière n'est pas trop importante, la probabilité pour un électron de franchir la barrière est non nulle, ce qui est bien entendu inconcevable pour une particule classique !

Ainsi, lorsqu'une pointe métallique se trouve à quelques Angströms d'une surface conductrice, les fonctions d'onde électroniques de la pointe et de l'échantillon se recouvrent, (comme deux nuages qui s'interpénètrent dans le ciel), et ceux-ci acquièrent alors une certaine probabilité de « sauter » de la pointe vers l'échantillon (et réciproquement de l'échantillon vers la pointe).

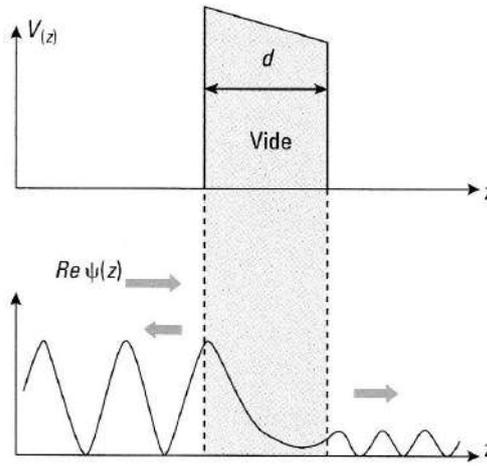


Fig 6. Fonction d'onde électronique de part et d'autre d'une barrière de potentiel. La fonction d'onde à gauche de la barrière déborde à droite de la barrière, si bien que la probabilité de présence est non-nulle : en clair, un électron a une probabilité non-nulle de franchir la barrière.

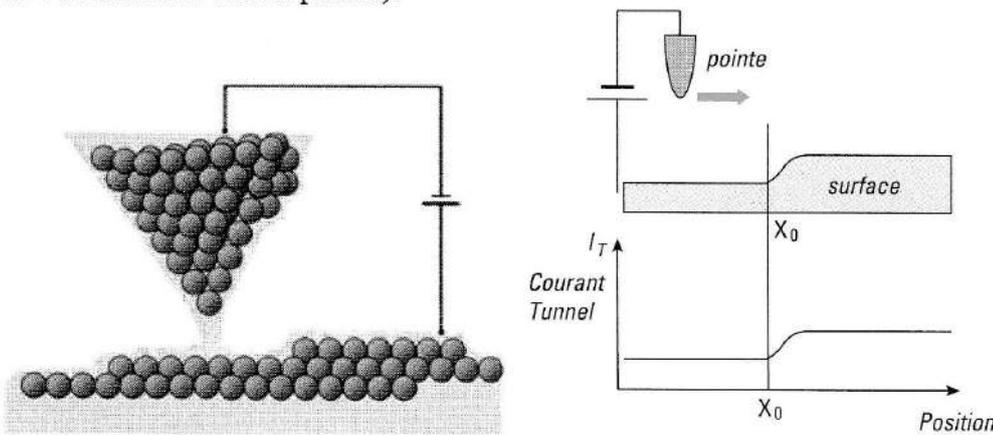


Fig 7 Gauche. Représentation artistique de la pointe et de l'échantillon ainsi que du recouvrement de leurs nuages électroniques respectifs. Droite : Quand la pointe est déplacée au dessus de l'échantillon à hauteur constante, une variation dans la topographie de la surface (ici une marche) donne lieu à une variation du courant tunnel. À partir de la valeur $I(x, y)$ du courant tunnel en chaque point (x, y) de l'échantillon, on accède donc à la topographie de la surface.

Quand une différence de potentiel est appliquée entre la pointe et l'échantillon, il en résulte un courant, appelé « courant tunnel ». Dans la situation d'une barrière tunnel épaisse, celui-ci décroît exponentiellement en fonction de la distance entre la pointe et la surface. Cette approximation est réalisée lorsque l'épaisseur de la barrière est grande devant la longueur caractéristique associée à la hauteur de la barrière [...]

Dans ces conditions le coefficient de transmission dans cette approximation dépend de l'énergie et vaut :

$$T = \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-2\sqrt{2m(V_0-E)}\frac{a}{\hbar}},$$

où V_0 est la hauteur de la barrière. Ainsi, dans la situation où une pointe métallique est balayée à hauteur constante au dessus d'une surface homogène, les variations du courant tunnel reflètent la morphologie de la surface (fig. 7 de droite). Celles-ci rendent possible « la visualisation des atomes » d'une surface. Plus précisément, on mesure les variations de densité électronique liées au réseau d'atomes sous jacent. Mais le mode habituel de fonctionnement consiste à balayer la pointe au dessus de la surface et de maintenir le courant constant

à l'aide d'une boucle de contre-réaction. Le courant tunnel est typiquement de l'ordre de nA, voire de quelques pA et il est donc nécessaire d'utiliser un amplificateur de courant. Le positionnement de la pointe est réalisé avec une très grande précision, typiquement de l'ordre de l'Angström, grâce à des matériaux piézo-électriques.

Questions :

- 1) Retrouver l'expression de la probabilité de présence derrière la barrière.
- 2) Le texte est volontairement coupé après [...]. Retrouver les conditions d'approximation évoquées.
- 3) Détailler le fonctionnement d'un microscope à effet tunnel.