

**Titre :** Effet Tunnel

**Présentée par :** Raphael Leriche

**Rapport écrit par :** Bernard Chelli

**Correcteur :** Jean Hare

**Date :** 10/02/2020

**Bibliographie de la leçon :**

Titre	Auteurs	Éditeur	Année
[1] Dunod tout en un PC-PC* 2014	Fosset		
[2] <a href="http://bupdoc.udppc.asso.fr/consultation/article-bup.php?ID_fiche=3903">http://bupdoc.udppc.asso.fr/consultation/article-bup.php?ID_fiche=3903</a>	BUP 734		
[3] <a href="https://www.youtube.com/watch?v=wQEqksTcARE">https://www.youtube.com/watch?v=wQEqksTcARE</a>	BUO 699		
Jean HARE. <i>Abrégé de mécanique quantique à l'usage de la préparation à l'agrégation de physique.</i> 2018	Jean Hare		2018

**Plan détaillée**

## Niveau choisi pour la leçon : CPGE

### Pré-requis :

- Équation de Shrodinger stationnaire
- Densité d'état
- Courant de densité de probabilité (**voir cours Jean Hare chapitre 2 section 2.1 et 2.3**)
- Radioactivité

### Plan:

#### I – Barrière de potentiel et effet tunnel

- 1) Position du problème
- 2) Raccordement et Probabilité de transmission

#### II – Une application technologique, le microscope à effet tunnel

- 1) Microscope à effet tunnel
- 2) La spectroscopie à effet tunnel

#### III – Radioactivité $\alpha$

### Introduction :

Comme il a été vu dans les cours de EM, (ex. effet de peau dans un conducteur), les champs **E** et **B** peuvent pénétrer sur une certaine distance dans la matière (réflexion totale). Étant donné la dualité onde-corpuscule, on peut se demander si les particules de matière (comme l'électron) peuvent aussi présenter un caractère similaire à l'onde évanescente, et quelles conséquences un tel phénomène peut-il avoir.

Commençons par considérer un profil d'énergie potentielle pour un électron qui aurait la forme d'une barrière de potentielle de largeur « a » et hauteur  $V_0$  (la dessiner de 0 à a).

Soit un électron provenant de la gauche et allant vers la droite avec une énergie cinétique  $0 < E < V_0$

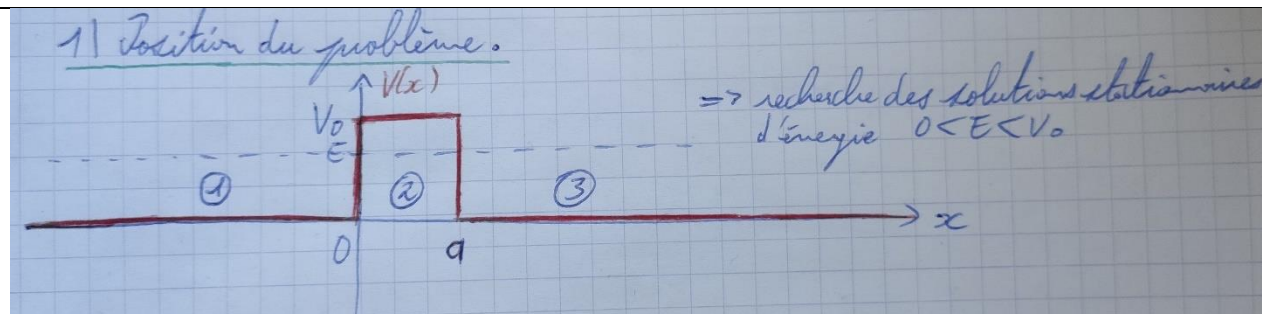
Ici on voit que l'électron classique ne peut pas exister dans la zone  $[0, a]$ . Du fait de la conservation de l'énergie mécanique, son existence impliquerait une énergie cinétique  $< 0$  ce qui est impossible.

Classiquement l'électron est donc réfléchi. Or que ce passe dans une approche quantique ?

### I) Barrière de potentiel et effet tunnel (2:40)

#### 1) Position du problème

Posons l'équation de shrodinger appliqué à la particule M de masse m arrivant de la gauche dans chaque région de l'espace (1, 2 et 3) :



Suivre le calcul du [1] p. 1200- 1201. Il faut l'adapter légèrement.

On obtient trois équations différentielles. Poser  $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$  et  $K = \frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}$  pour simplifier l'écriture des résultats.

Donner les solutions pour les trois régions :

$\Rightarrow$  La fonction d'onde admet pour solution :

$$\begin{cases} \psi_1(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx} \\ \psi_2(x) = C \operatorname{ch}(Kx) + D \operatorname{sh}(Kx) \\ \psi_3(x) = E e^{ikx} + F e^{-ikx} \end{cases}$$

\* On suppose une onde incidente provenant de la gauche

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= e^{ikx} + r e^{-ikx} \\ \psi_2(x) &= C \operatorname{ch}(Kx) + D \operatorname{sh}(Kx) \\ \psi_3(x) &= t e^{ikx} \end{aligned}$$

On normalise tout par l'onde incidente et on pose  $r$  et  $t$ .

## 2) Raccordement et Probabilité de transmission (8:30)

Le raccordement est un peu fastidieux et calculatoire, donc ne pas le faire. Par contre l'avoir en tête : [1] p. 1202. Le résultat diffère dans 1 du fait d'avoir choisi une barrière centrée sur 0, mais les calculs sont les mêmes.

Montrer le résultat obtenu sur slide :

### Calcul des coefficients de transmission et de réflexion

$$\begin{cases} 1 + r = te^{ika} \left[ ch(Ka) - \frac{ik}{K} sh(Ka) \right] \\ \frac{ik}{K} (1 - r) = -te^{ika} \left[ sh(Ka) - \frac{ik}{K} ch(Ka) \right] \end{cases}$$

Après calcul :

$$\begin{cases} t = \frac{2e^{-ika} kK}{2kK ch(Ka) - i(k^2 - K^2) sh(Ka)} \\ r = \frac{-i(k^2 + K^2) sh(Ka)}{2kK ch(Ka) - i(k^2 - K^2) sh(Ka)} \end{cases}$$

On trouve :

$$\underbrace{|t|^2}_T + \underbrace{|r|^2}_R = 1$$

$$T = \frac{4k^2 K^2}{4k^2 K^2 + (k^2 + K^2)^2 sh^2(Ka)}$$

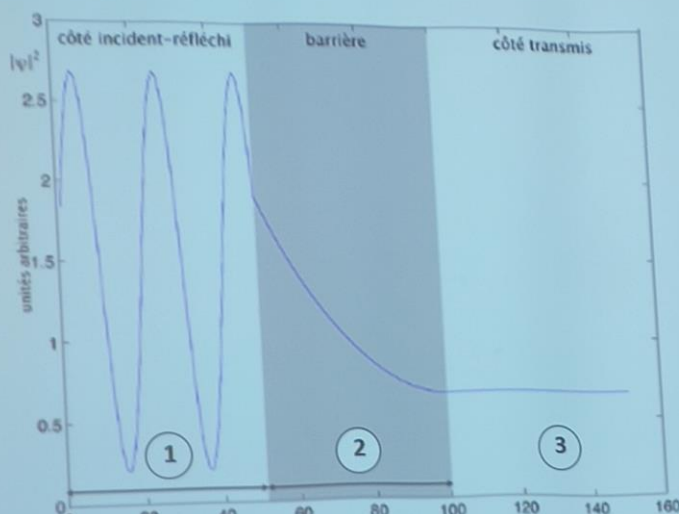
$T \equiv$  probabilité de transmission

Ce qui nous intéresse est le module au carré des coefficients  $r$  et  $t$ , qui traduisent une probabilité de réflexion et transmission respectivement.

Lire le bas de [1] p. 1203 pour quelques commentaires physiques.

Le raccordement des fonctions aux différents points est montré sur slide :

### Probabilité de présence dans la barrière



①  $|\psi|^2 = 1 + R + 2\sqrt{R} \cos(2kx - \varphi)$

② Décroissance sur une longueur caractéristique :

$$\delta = \frac{1}{K} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$$

③  $|\psi|^2 = T$

Dans 1 : on a des interférences avec l'onde réfléchi

Dans 2 : on a une densité de probabilité de présence non nulle qui diminue avec la hauteur de la barrière. On introduit alors 2 une longueur caractéristique de décroissance. Donc plus la barrière est épaisse et haute, plus faible sera la probabilité de présence de la particule à la sortie de la barrière.

Dans 3 : la probabilité de présence est uniforme et égale à T

Une discussion est faite dans [1] p. 1204.

Lorsque  $Ka \gg 1$  on est dans le cas d'une barrière épaisse (fait aussi dans [1] p. 1204). Alors l'expression de T se simplifie car  $\text{sh}(Ka) \sim \frac{e^{Ka}}{2}$ .

Alors 
$$T \sim \frac{16k^2 K^2 e^{-2Ka}}{(k^2 + K^2)^2} \sim \frac{16E(V_0 - E) e^{-\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)}}}{(V_0)^2}$$
 Expression fondamentale pour la suite

Montrer slide avec courant de probabilité qui est admis et préciser que  $J_3$  est proportionnel à T. (Rq. BC au niveau CPGE je préfère me limiter à l'expression du vecteur densité de courant de probabilité de [1] p. 1160 qui donne le résultat de manière immédiate.)

### Courant de probabilité de présence

Courant de probabilité :

$$J(x, t) = \frac{\hbar}{2im} \left[ \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right]$$

Après calcul :

$$J_3(x, t) = \frac{\hbar k}{m} T$$

⇒ **Le courant tunnel  $I$  est proportionnel à  $T$**

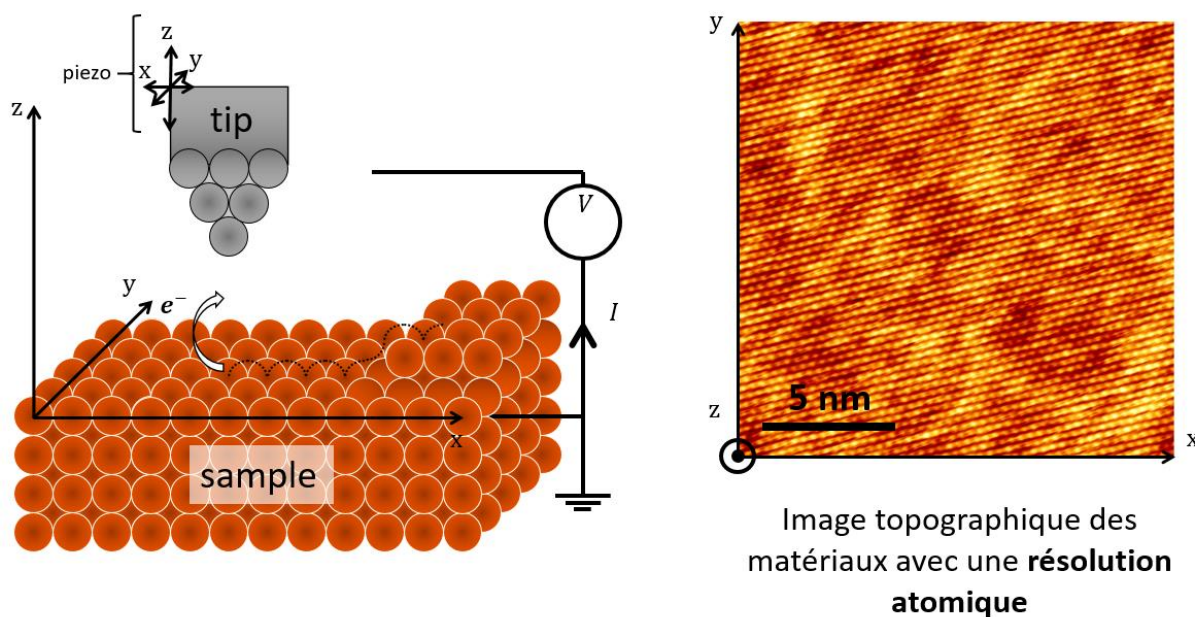
Si on s'intéresse à un ensemble d'électrons qui arrivent de la gauche sans la zone 1, il est clair qu'on pourra voir l'apparition d'un autre courant dans la zone 2 qui résulte des électrons qui ont traversé la barrière de potentiel par effet tunnel. Alors le courant électrique sera proportionnel à T. Ceci est exploité dans le microscope à effet tunnel

## II – Une application technologique, le microscope à effet tunnel (13:33)

1) Microscope à effet tunnel (voir [3])



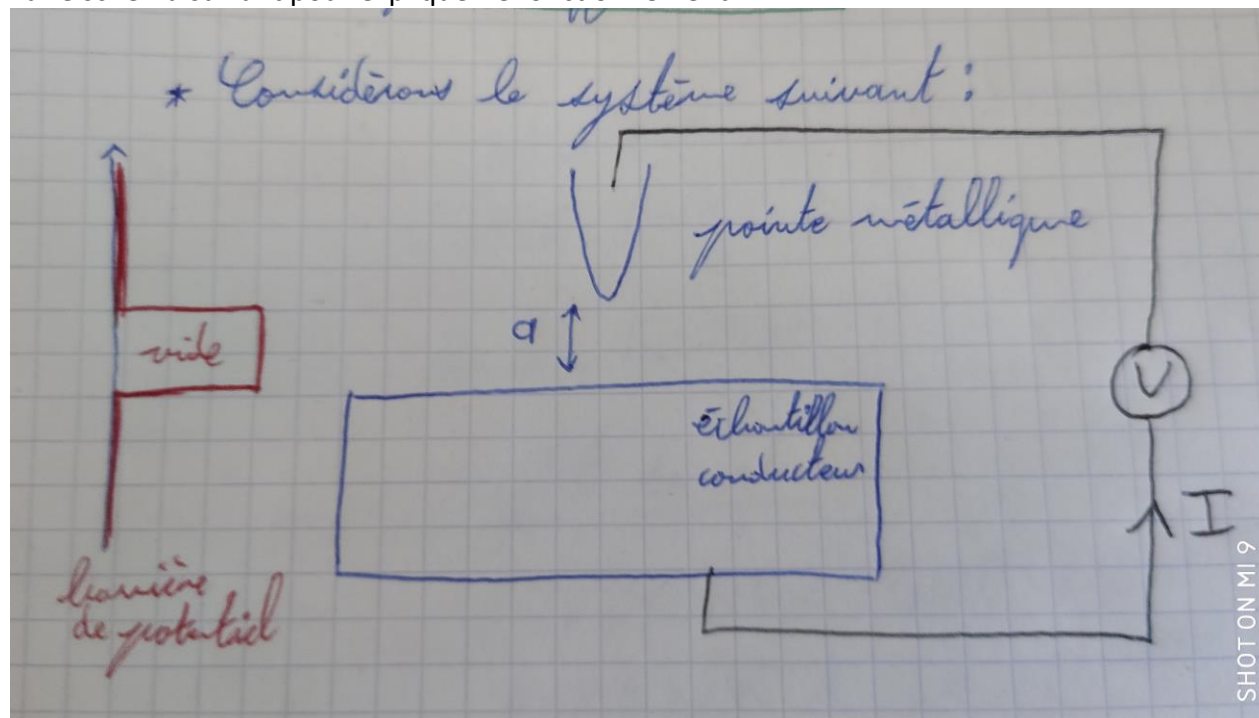
## Principe du microscope à effet tunnel (STM)



- Prix Nobel 1986 G. Binnig et H. Rohrer

Suivre l'introduction p. 1269 de [3] et présenter sur slide.

Faire schéma suivant pour expliquer le fonctionnement :



Préciser que :

- l'échantillon et la pointe sont des conducteurs ;
- On applique une différence de potentiel, alors et seulement alors, l'air entre la pointe et l'échantillon se comporte comme une barrière de potentiel ;
- L'échantillon est un solide, donc un assemblage d'atomes ;
- On mesure un courant tunnel  $I \propto I_0 e^{-B \cdot d \sqrt{\phi}}$ , où  $\phi$  est la hauteur relative de la barrière de potentiel qui dépend du potentiel appliqué et des matériaux conducteurs.  $I_0$  dépend du potentiel appliqué aussi. (voir [3] p. 1269-1270, aussi [1] p. 1207-1208)

Discuter le courant  $I$  avec la formule du courant de probabilité, on peut l'approximer par un courant proportionnel à  $e^{-\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2m(V_0-E)}}$ .

Expliquer le fonctionnement du microscope (soit on se place à hauteur constante et on regarde le courant tunnel qui varie, soit on se place à courant constant avec une boucle d'asservissement et on regarde la hauteur de la pointe). La pointe est contrôlée par des piezo.

Présenter des ordres de grandeur :

- pour  $E \sim 0$  avec  $m$  électron de  $9.109 \cdot 10^{-31} \text{kg}$  et  $V_0 \sim 4 \text{eV}$  (travail de sortie typique des métaux cf. [3] p. 1271) :

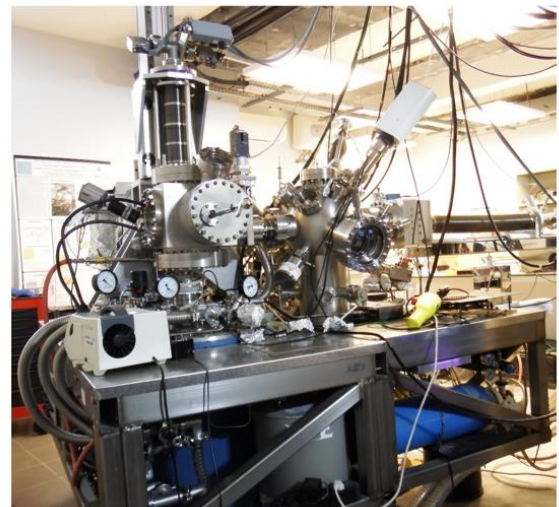
Si on passe de  $a = 5 \text{\AA}$  à  $6 \text{\AA}$ , le coefficient de transmission  $T$  diminue d'un facteur 10, donc très précis en hauteur (résolution transverse) (De l'ordre de  $10^{-11} \text{m}$ ).

Parler de la résolution latérale avec un schéma (c.f. [3] p. 1275). Donc importance de la pointe ! (résolution latérale de l'ordre de  $1 \text{\AA}$  avec une bonne pointe).

Parler des conditions de la pointe sur slide et sur les vibrations (lire début de la p. 1274 de [3]).

### Conditions d'imagerie par effet tunnel

- Pointe très fine, terminée par un seul atome, pour garantir résolution atomique
- Pouvoir contrôler les déplacements de la pointe à la fraction d'Angström (grâce à piézoélectriques)
- Eliminer les vibrations qui perturbent la mesure

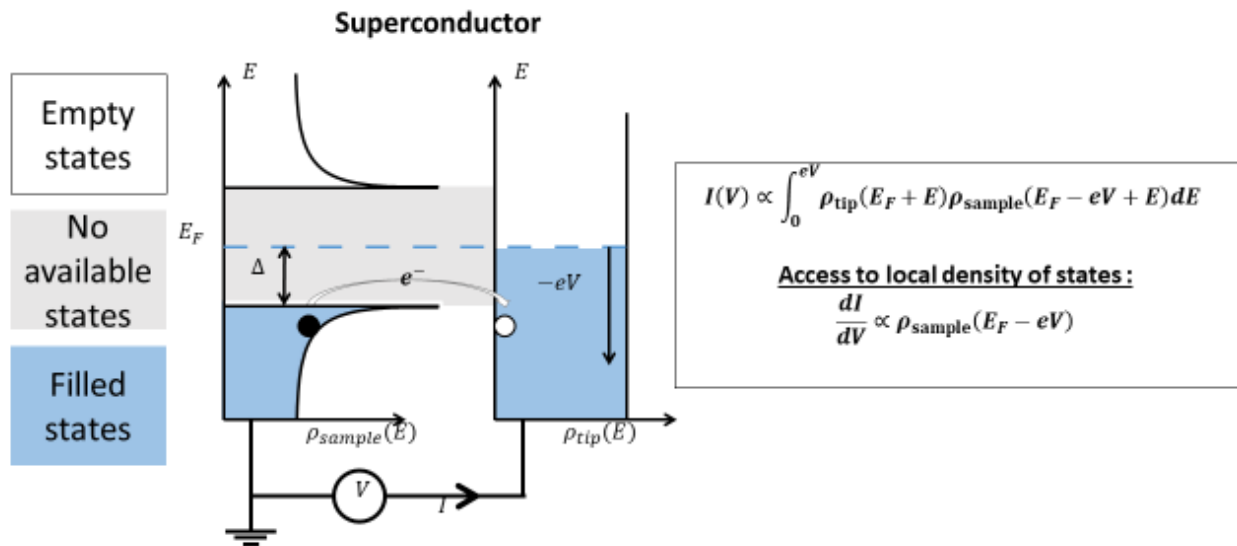


Microscope M3, équipe SNEQ, INSP, Paris

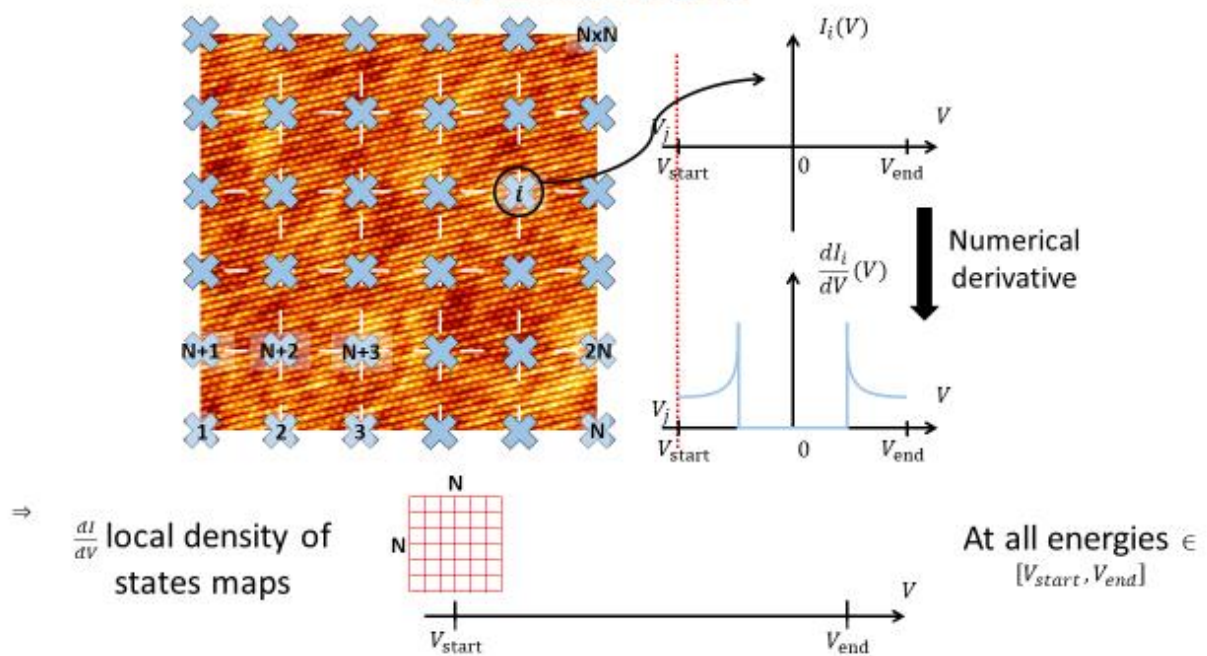
B) Mode spectroscopique (22:36)

Optionnel car complexe. On peut lire [3] p. 1278-1281 pour le présenter avec les slides suivants.

## Principe de la spectroscopie à effet tunnel (STS)

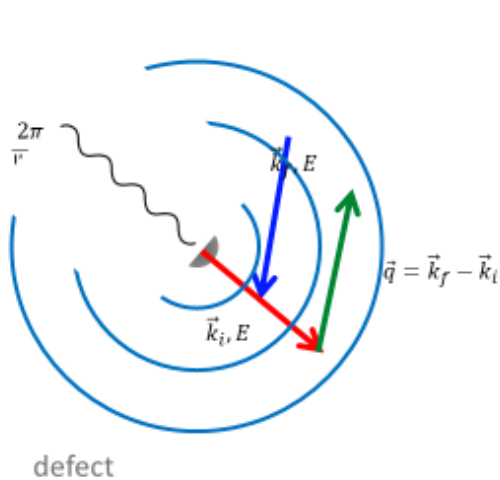


## Spectroscopie de grille





## Quasiparticle interferences



$$\psi_i = e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}}$$

$$\psi_f = e^{i\vec{k}_f \cdot \vec{r}}$$

$$\psi_{interference} = \psi_i + \psi_f$$

In STM only access to **local density of states** :

$$\|\psi_{interference}\|^2 = 2(1 + 2\cos(\underbrace{(\vec{k}_f - \vec{k}_i) \cdot \vec{r}}_{\vec{q}}))$$

Fourier transform STM :

$$FFT(\|\psi_{interference}\|^2) \sim \delta(\vec{q}) + \delta(-\vec{q})$$

## Quasiparticle interferences

Example :  
Hexagonal Brillouin zone with a given energy contour at  $E_1$  :

$$E = E_1$$



Fourier transform of the LDOS map at energy  $E_1$

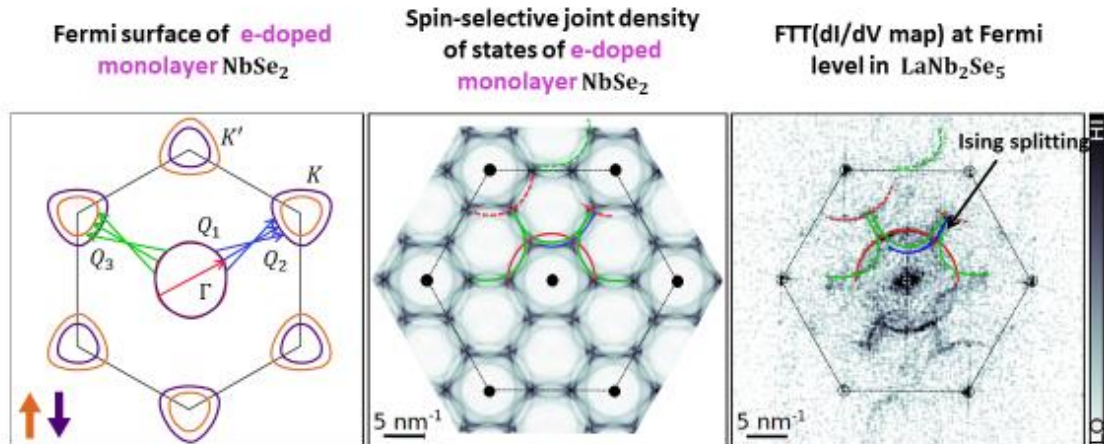


**How to obtain local density of states maps ?**

- Collection of scattering wave vectors linking many isoenergy states.

The Fourier transform of the LDOS map is linked to the autoconvolution of the energy contour:  
⇒ Joint DOS

### Interpretation of the QPIs results



⇒ LaNb<sub>2</sub>Se<sub>5</sub> behaves as electron-doped monolayer NbSe<sub>2</sub> shifted of ~0,3 eV towards higher energies

⇒ Presence of strong Ising spin-orbit coupling

32

### III – Radioactivité α (26 :00)

Faire un rappel sur la radioactivité α [3] p. 1211-1212.

Prendre la réaction  ${}^{226}_{88}\text{Ra} \rightarrow {}^{222}_{86}\text{Rn} + {}^4_2\text{He}$  (désintégration du Radium dans du Radon He particule alpha).

Montrer slide (chiffres se trouvent dans [1]):

### Désintégration α

Noyau	Demi-vie $\tau_{1/2}$ (s)	E (MeV)
${}^{212}_{84}\text{Po}$	$3,0 \cdot 10^{-7}$	9,0
${}^{215}_{85}\text{At}$	$1,0 \cdot 10^{-4}$	8,1
${}^{222}_{88}\text{Ra}$	$3,3 \cdot 10^5$	5,6
${}^{226}_{88}\text{Ra}$	$5,4 \cdot 10^{10}$	4,9
${}^{236}_{92}\text{U}$	$7,2 \cdot 10^{14}$	4,4
${}^{232}_{90}\text{Th}$	$4,4 \cdot 10^{17}$	4,0

$$E \nearrow \Rightarrow \tau_{1/2} \searrow$$

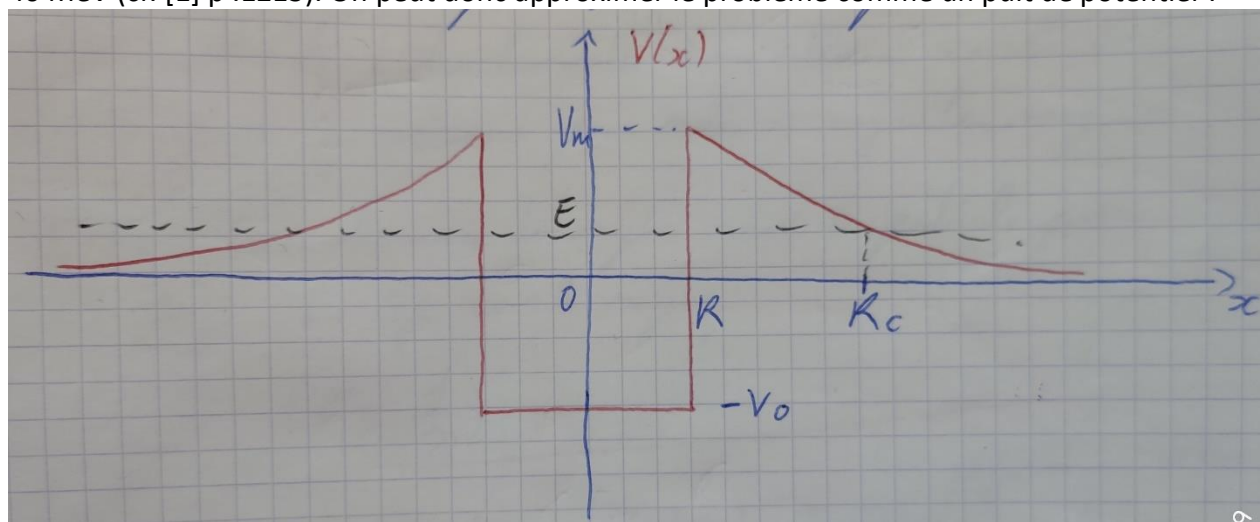
Parler que expérimentalement il semble que si  $E$  augmente  $T_{1/2}$  diminue. On se propose de modéliser ce résultat avec l'effet tunnel.

On introduit le modèle de Gamow, Gurney et Condon ([3] p. 1213-1215, les calculs sont faits dans [2] p. 738-740).

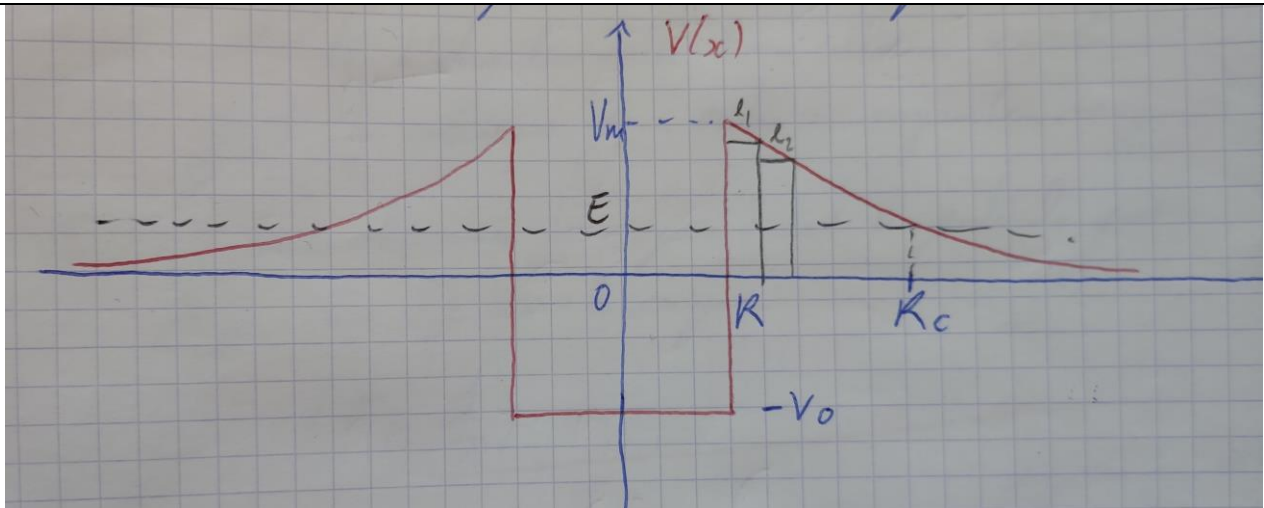
Hypothèses :

- On suppose que la particule alpha de masse  $m$  existe à l'intérieur du noyau et oscille à l'intérieur avec un mouvement de va et vient;
- On suppose qu'elle est soumise à une  $E_p$  résultant de l'interaction forte de courte portée supposée nulle à partir d'une distance  $R_0$  ( $\sim 10^{-14}\text{m}$ );
- On suppose que la particule alpha est soumise aussi à la répulsion électrostatique entre la particule alpha et le nouveau noyau à  $Z-2$  protons tq  $E_{\text{Coulomb}} = \frac{2e(Z-2)e}{4\pi\epsilon_0 r}$ ;
- On suppose à l'intérieur du noyau de rayon  $R$ , le potentiel qui domine est l'interaction forte ;
- On suppose  $R_0 \gg R$  ;
- On suppose un puit de potentiel sphérique.

On note que  $E$  de la particule alpha est de 4,9 MeV et que la répulsion coulombienne  $V$  en  $R$ ,  $V \sim 40$  MeV (cf. [1] p. 1213). On peut donc approximer le problème comme un puit de potentiel :



Pour faire le calcul il faut découper le potentiel en barrières rectangulaires. Alors on constate que la probabilité de transmission à travers 2 barrières de hauteur différente est:



$$T(l_1 + l_2) \propto T(l_1) * T(l_2)$$

$$\propto e^{\frac{-2}{\hbar} * l_1 * \sqrt{2 * m \left( \frac{2e(Z-2)e}{4\pi\epsilon_0 l_1} - E \right)}} * e^{\frac{-2}{\hbar} * l_2 * \sqrt{2 * m \left( \frac{2e(Z-2)e}{4\pi\epsilon_0 l_2} - E \right)}}$$

$$T(l_1 + l_2) \propto e^{\frac{-2}{\hbar} * \sum l * \sqrt{2 * m \left( \frac{2e(Z-2)e}{4\pi\epsilon_0 l} - E \right)}}$$

Si on passe au continu :

$$T(x) \propto e^{\frac{-2}{\hbar} * \int_R^{R_0} dx \sqrt{2 * m \left( \frac{2e(Z-2)e}{4\pi\epsilon_0 l} - E \right)}}$$

Le calcul de cette intégrale est long et complexe avec plusieurs changements de variables ([voir \[2\] p. 739-740 et le cours de Jean Hare p. 88](#)).

En faisant le calcul on trouve :

$$\ln(T) = \frac{4R}{\hbar} \sqrt{U * m * Z} - \frac{\pi * R * U}{\hbar} \sqrt{\frac{2m}{E}}$$

Avec  $U = \frac{2e(Z-2)e}{4\pi\epsilon_0}$

Or T est la probabilité de sortir de l'atome à chaque collision avec la barrière. En moyenne il faut  $1/T$  collisions pour que la particule alpha soit éjectée de l'atome.

Alors si  $t_0$  est la durée de traversée du noyau, la particule passe un temps  $t = t_0/T$  dans le noyau.

On déduit :

$$t_{1/2} = t \ln(2) \propto e^{-\frac{4R}{\hbar} \sqrt{U * m * Z} + \frac{\pi * R * U}{\hbar} \sqrt{\frac{2m}{E}}}$$

Si  $E$  augmente,  $t_{1/2}$  diminue. Cette loi est globalement vérifiée sur 26 ordres de grandeur ! (c.f. FIG. 4 p. 86 du cours de Jean Hare tiré du cours de Berkley)

**Conclusion** sur d'autres applications possibles, par exemple le double puit de potentiel pour modéliser des liaisons chimiques ou autres utilités du microscope à effet tunnel si on se sent capable de répondre aux questions.



## Annexe : calcul de raccordement

2) Raccordement.

Égalité des fonctions d'onde et dérivée par rapport à  $x$  en  $x=0$  et  $x=a$

$$\Rightarrow \begin{cases} \psi_1(0) = \psi_2(0) \\ \frac{\partial \psi_1(0)}{\partial x} = \frac{\partial \psi_2(0)}{\partial x} \\ \psi_2(a) = \psi_3(a) \\ \frac{\partial \psi_2(a)}{\partial x} = \frac{\partial \psi_3(a)}{\partial x} \end{cases}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} 1+r = C & \textcircled{I} \\ i\hbar - i\hbar r = KD & \textcircled{II} \\ C \operatorname{ch}(Ka) + D \operatorname{sh}(Ka) = t e^{i\hbar a} & \textcircled{III} \\ (K \operatorname{sh}(Ka) + D K \operatorname{ch}(Ka) = i\hbar t e^{i\hbar a} & \textcircled{IV} \end{cases}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} C = 1+r \\ D = \frac{i\hbar}{K}(1-r) \\ \textcircled{III} \times K \times \operatorname{sh}(Ka) - \textcircled{IV} \times \operatorname{ch}(Ka): \\ -DK = t e^{i\hbar a} [K \operatorname{sh}(Ka) - i\hbar \operatorname{ch}(Ka)] \\ \textcircled{II} \times K \times \operatorname{ch}(Ka) - \textcircled{IV} \times \operatorname{sh}(Ka): \\ CK = t e^{i\hbar a} [K \operatorname{ch}(Ka) - i\hbar \operatorname{sh}(Ka)] \end{cases}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} C = 1 + r \\ D = \frac{ih}{K} (1 - r) \\ C = t e^{i h a} \left[ \operatorname{ch}(Ka) - \frac{ih}{K} \operatorname{sh}(Ka) \right] \\ D = -t e^{i h a} \left[ \operatorname{sh}(Ka) - \frac{ih}{K} \operatorname{ch}(Ka) \right] \end{cases}$$

### Questions posées par l'enseignant

**Vous avez parlé d'ondes stationnaires, c'est approprié ?**

Non, il n'y a pas de nœuds.

**Que caractérise une onde stationnaire ?**

Pas de dépendance temporelle, il faut des nœuds et des ventres.

**Le diagramme (du raccordement du puit de potentiel) est-il conforme à ce que vous présentez ?**

Non il devrait y avoir continuité de la dérivée.

**Dans la limite de la zone 2-3 comment pouvez-vous arriver entre la zone 2 et la zone 3 avec une tangente horizontale ?**

On ne sait pas si dans la zone 2 il y a une exponentielle dû à la réflexion au niveau de l'interface 2-3 (onde anti-évanescence en retours). Alors sur cette interface on aura 2 ondes opposées qui ont la même amplitude ce qui donne une tangente horizontale.

**Comment obtenez-vous dans la zone 3 que le courant est constant ?**

Par calcul est du fait qu'on a une seule onde propagative

**Il y a une condition sur le métal de la pointe pour le microscope à effet tunnel ?**

Oui, il faut qu'elle soit métallique ex. en platine coupé et qu'elle ne soit pas chimiquement active.

**Pourquoi vous utilisez la masse de l'électron dans l'onde évanescente ?**

Ça dépend du matériau mais ça peut arriver qu'on ait le droit de le faire.

**Est-ce que  $|r^2| + |t^2| = 1$  est toujours valable ? que représente r et t ?**

R est le coefficient de réflexion en amplitude et t le coefficient de transmission en amplitude.

**Dans un problème de collision quantique on a toujours  $|r^2| + |t^2| = 1$  ?**

Ce qui compte c'est le coefficient de transmission en courant. Cette formule est étroitement liée à une hypothèse du modèle : les énergies en dehors de la barrière sont les mêmes

**Vous avez parlé d'une onde évanescente en électromagnétisme, c'est pareil ou il y a une différence importante entre les 2 ?**

On a une perte d'énergie.

En EM, on a un vecteur de Poynting et l'énergie transportée par l'onde évanescente est dissipée par le métal. En MQ on n'a pas d'effets dissipatifs car tant qu'on n'est pas arrivé à la fin de la barrière on n'aura pas de courant.

**La loi de la radioactivité alpha marche bien ?**

Oui, sur plus de 26 ordres de grandeur.

Partie réservée au correcteur

**Avis général sur la leçon (plan, contenu, etc.)**

**Notions fondamentales à aborder, secondaires, délicates**

**Expériences possibles (en particulier pour l'agrégation docteur)**

**Bibliographie conseillée**