PHYS2026-1: Physique 4 - Physique microscopique
Introduction à la mécanique quantique - Projet

L'effet tunnel

L'effet tunnel est un phénomène surprenant qui résulte du formalisme de la mécanique quantique. Ce phénomène, découvert en 1928 par Georges Gamow, a notamment permis d'expliquer la radioactivité α. Il est également exploité en nano/micro-électronique, étant à la base de dispositifs comme les MRAMs (Magnetic Random Access memory) et a également donné lieu à des instruments de mesure à l'échelle atomique comme le microscope à effet tunnel, qui nous permettent désormais d'accéder au monde sub-micrométrique.
En mécanique classique, l'énergie d'un corps doit être supérieure ou égale à l'énergie potentielle liée à une barrière pour pouvoir la franchir. Cependant, dans le formalisme de la mécanique quantique, on peut montrer qu'il est possible pour une particule de passer au travers d'une barrière, et ce même si son énergie est inférieure à la limite imposée par la mécanique classique.

Dans le cadre de ce projet, il vous est demandé d'examiner, par une étude numérique, ce phénomène en utilisant l'équation de Schrödinger indépendante du temps pour décrire le comportement d'une particule face à une barrière de potentiel. Pour cela, vous devrez numériquement implémenter la méthode dite "transfer-matrix method" (TMM), et l'appliquer à l'exploration des effets quantiques de la barrière sur les propriétés de la particule. Votre rapport doit au moins contenir les sections suivantes :

1. Une description vulgarisée de l'effet tunnel (définition, comparaison classique vs. quantique, *etc.*). Cette partie ne doit (presque) pas contenir d'équation, l'idée étant d'expliquer l'effet tunnel à des "non-experts".

2. La résolution analytique de l'équation de Schrödinger indépendante du temps en utilisant le formalisme matriciel: il s'agit donc de déterminer la matrice M_T qui lie la fonction d'onde incidente à celle transmise. De cette dernière, en déduire la fonction $T(E)$, qui décrit la fraction de particules incidentes qui est transmise au delà d'une barrière rectangulaire en fonction de l'énergie E de la particule incidente.

3. Une description de la méthode utilisée pour aborder le problème d'une barrière triangulaire quelconque via une succession de n barrières rectangulaires. Cette section doit contenir une explication de la méthode que vous avez utilisée pour déterminer la largeur et la hauteur de chacun des n barrières. Justifiez votre choix.

4. Une description, assez brève, de votre implémentation en Python de l'algorithme permettant de résoudre numériquement Schrödinger par la méthode de TMM.

5. L'analyse des effets de la hauteur V_0 et de la largeur a d'une barrière rectangulaire sur $T(E)$. Utilisez des valeurs pour a comprises entre 1 et 10 nm (par pas de 0.5 nm), et V_0 entre 0.1 et 1 eV (par pas de 0.05 eV). Faites-en de même pour une barrière triangulaire. Veillez à bien discuter les résultats obtenus (ne vous contentez pas de les décrire).

6. Une étude de convergence de la résolution numérique de l'équation de Schrödinger 1D pour une approximation d'ordre n de la barrière triangulaire. Il s'agit donc de déterminer n_{opt}, l'ordre de l'approximation maximisant la précision du résultat et minimisant le temps de calcul. Déterminez la valeur de n minimisant la fonction
$$P(n) = 4|\epsilon(n)| + |\Delta t(n)| \tag{1}$$
où $\epsilon(n) = |\frac{T(n)-T(101)}{T(101)}|$ et où $\Delta t(n) = t(n)/t(101)$ est le temps de calcul normalisé par le temps correspondant à 101 itérations. Mettez en évidence l'optimisation du système (variation de $P(n)$ avec n) pour le cas $E = 0.25$ eV et $a = 2.5$ nm. Montrez ensuite comment n_{opt} varie avec les paramètres de la barrière de potentiel triangulaire (utilisez la même gamme de valeurs que pour le point 5). Quand vous l'estimez nécessaire, discutez de ces résulats.

Concernant la taille du rapport, le point 1 sera d'une longueur comprise entre 0.5 et 1 page. Le point 2 donnera lieu à un texte compris entre 2 et 4 pages. Les points 3 et 4 devraient feront, au total, environ 2 pages. Le point 5 doit vous permettre de produire entre 3 à 5 pages (figures et tables comprises). Pour le point 6, vous pouvez prévoir entre 1 et 2 pages. Une conclusion, d'une longueur comprise entre 0.5 et 1 page, doit également être prévue. Celle-ci consistera en un bref résumé de vos résultats et une mise en perspective des implications physiques de vos découvertes. N'oubliez pas non plus d'inclure une bibliographie. Le détail du nombre de pages doit vous servir de guide et de garde-fou. Si le rapport est un peu en dehors des limites, il n'y a pas nécessairement d'inquiétude à avoir pour l'évaluation. Par contre, un rapport de 30 pages (hors annexe) ne sera certainement pas accepté. Finalement, n'oubliez pas d'interpréter physiquement au maximum vos résultats, et de ne pas vous contenter de les décrire. En effet, il s'agit d'un projet à développer dans le cadre d'un cours de *physique*.

Pour terminer, voici quelques indications susceptibles de vous aider dans le travail de programmation:

1. En principe, seules les bibliothèques Numpy et Matplotlib sont nécessaires pour réaliser le projet. La bibliothèque time est également utile pour la question 6.
2. Il existe un type complex dans Numpy.
3. Il est fortement recommandé (pour votre bien!) d'utiliser un environnement virtuel Python pour réaliser le projet. Cela vous évitera bien des ennuis par la suite, et vous permettra de facilement nous communiquer les librairies que vous aurez utilisées ainsi que leur version en utilisant pip3 freeze > requirements.txt.
4. Et bien sûr... Divisez bien votre code en fonctions et commentez-le autant que nécessaire !

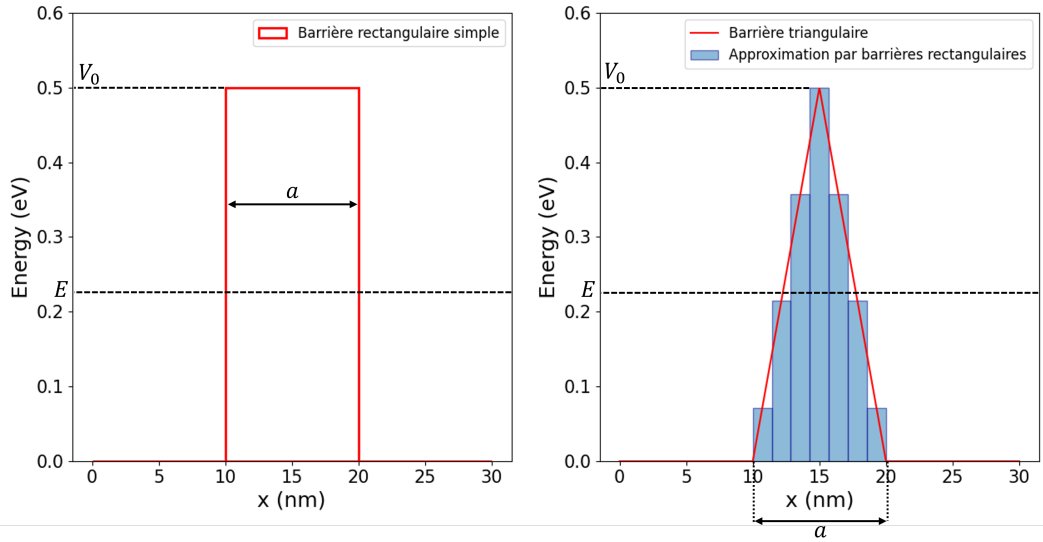

Figure 1: Profil de barrière d'énergie potentielle pour (a) une barrière rectangulaire simple de largeur a et hauteur V_0, (b) une barrière triangulaire de largeur a et de hauteur V_0, approximée par $n = 10$ barrières rectangulaires. L'énergie E d'une particule est également montrée.