Effet tunnel

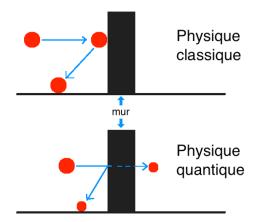
Niveau: CPGE/L2

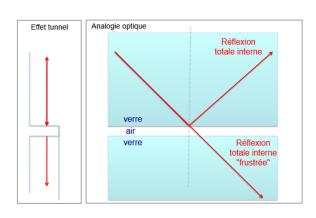
Prérequis : équation de Schrödinger, états stationnaires, OPPH, ondes évanescentes

Introduction

L'effet tunnel est un phénomène découvert au début du XXe siècle avec l'avènement de la mécanique quantique. Il est responsable de nombreux phénomènes physiques comme la radioactivité alpha, la fusion nucléaire, la liaison chimique, l'inversion de la molécule d'ammoniac, etc... Il a également de nombreuses applications (microscope à effet tunnel, MASER, jonction entre deux supraconducteurs).

L'effet tunnel intervient lorsqu'on envoie une particule sur une barrière de potentiel avec une énergie E plus petite que la hauteur de la barrière de potentiel. En mécanique newtonienne, la particule ne peut pas accéder aux zones où V (x) > E puisque E = $E_c + V$ (x) avec $E_c > 0$. En mécanique quantique, nous allons le voir dans cette leçon, la particule possède une probabilité non nulle de traverser la barrière. Notons qu'il existe un domaine de la physique classique où une sorte d'effet tunnel est possible, c'est la physique ondulatoire. En effet, en accolant deux prismes et en envoyant un rayon lumineux avec un angle d'incidence plus grand que l'angle de réflexion totale, on observe tout de même un rayon lumineux en sortie du deuxième prisme. L'optique géométrique ne prévoit pas cet effet mais l'électromagnétisme prédit l'existence d'une onde évanescente entre les deux prismes, qui a une amplitude suffisante pour pouvoir atteindre le second prisme. L'onde se propage alors dans le second prisme. On va retrouver ce même type de phénomène, en particulier l'existence d'ondes évanescentes sous la barrière, où $E < V_0$.





L'effet tunnel n'est pas compréhensible à l'aide de la mécanique classique mais l'est parfaitement grâce à la physique ondulatoire

I Présentation de l'effet tunnel

1) Barrière de potentiel en mécanique quantique

En mécanique quantique, l'état d'une particule est décrit par sa fonction d'onde $\psi(x, t)$. Son évolution est donnée par l'équation de Schrödinger dépendante du temps. Lorsque le potentiel est indépendant du temps, on peut séparer les variables et on obtient alors un état stationnaire qui s'écrit :

$$\psi(x,t) = \phi(x)exp(-i\frac{E}{\hbar}t)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\phi''(x) + V(x)\phi(x) = E\phi(x) \qquad \phi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\phi(x) = 0$$

On résout cette équation dans les trois zones avec V constant par morceaux On voit que selon le signe de E-V(x), on aura soit des solutions exponentielles complexes si E>V, soit des solutions exponentielles réelles si E<V On en déduit directement les 3 solutions :

$$\begin{cases}
\phi_1(x) &= A_1e^{ikx} + B_1e^{-ikx} \\
\phi_2(x) &= A_2e^{qx} + B_2e^{-qx} \\
\phi_3(x) &= A_3e^{ikx} + B_3e^{-ikx}
\end{cases}$$

Interprétons maintenant les solutions obtenues. Si on regarde la solution dans la zone 1, la fonction d'onde totale prenant en compte l'aspect temporel s'écrit :

$$\psi_1(x,t) = A_1 \exp(-i(\frac{E}{\hbar}t - kx)) + B_1 \exp(-i(\frac{E}{\hbar}t + kx))$$

On interprète donc facilement le terme en A_1 comme une OPPH se propageant dans le sens des x croissants (c'est l'onde incidente), alors que B_1 représente une OPPH se propageant dans le sens des x décroissants (c'est l'onde transmise). La solution dans la zone 2 a une forme différente. En effet, elle ne présente pas de terme de propagation, c'est une onde évanescente. La solution dans la zone 3 est similaire à celle dans la zone 1. On remarque que la résolution de l'équation fait apparaître une onde se déplaçant dans la zone 3 vers les x décroissants. Or il n'y a pas d'onde venant de la droite puisque le potentiel est nul sur toute la zone 3 donc cette onde n'a pas d'existence physique, on prendra donc par la suite $B_3 = 0$.

2) Coefficient de transmission

On peut réécrire l'équation de Schrödinger dépendante du temps sous la forme d'une équation de conservation :

On peut réecrire l'équation de Schrodinger dépendante du temps sous la forme d'une équation de conservation

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial J}{\partial x} = 0$$

avec

$$\rho = |\psi|^2$$

la densité de probabilité de présence de ψ et

$$J = i \frac{\hbar}{2m} (\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - c.c)$$

le courant de probabilité de ψ . On peut calculer ψ pour l'onde incidente, l'onde réfléchie et l'onde transmise et on obtient :

$$\begin{cases} J_{i} = \frac{\hbar k}{m} |A_{1}|^{2} \\ J_{r} = \frac{\hbar k}{m} |B_{1}|^{2} \\ J_{t} = \frac{\hbar k}{m} |A_{3}|^{2} \end{cases}$$

On peut alors définir le coefficient de transmission et le coefficient de réflexion T et R :

$$R = \frac{J_r}{J_i} = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2}$$

 $T = \frac{J_t}{J_i} = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2}$

Enfin, pour calculer T, il nous faut déterminer les constantes apparaissant dans les expressions de ψ . Pour cela, on utilise la propriété suivante : ψ et ψ ' sont continues au voisinage d'une discontinuité finie du potentiel, ce qui est le cas ici. On obtient alors les relations suivantes :

$$\begin{cases}
A_1 + B_1 &= A_2 + B_2 \\
ik(A_1 - B_1) &= q(A_2 - B_2) \\
A_2e^{qa} + B_2e^{-qa} &= A_3e^{ika} \\
q(A_2e^{qa} - B_2e^{-qa}) &= ikA_3e^{ika}
\end{cases}$$

 A_1 est une caractéristique de l'onde incidente, ce n'est pas une inconnue, ce qui nous intéresse c'est le rapport $\frac{|A_3|^2}{|A_1|^2}$. On peut donc prendre $A_1=1$. On a alors un système de quatre équations à quatre inconnues, qu'il est possible de résoudre. On obtient après quelques lignes de calculs :

$$T = \frac{1}{1 + \frac{V_o^2}{4E(V_o - E)} sh^2(qa)}$$

On peut regarder cette expression dans l'approximation de la barrière épaisse : qa >> 1 implique que $sh^2(qa) \approx \frac{e^{2qa}}{4} \gg 1$. Le terme en facteur devant l'exponentielle est toujours plus grand que ¼ (on peut étudier la fonction x(1 – x) avec x = E/V₀ < 1 (maximum pour x = 0,5 et vaut 0,25)). On peut négliger le 1 au dénominateur et on obtient :

$$T = 16 \frac{E(V_o - E)}{E^2} e^{-2qa}$$

Le préfacteur de l'exponentielle est toujours plus petit que 4. On va être amené à travailler avec ln(T) par la suite, on voit que le préfacteur va être négligeable devant qa. On oublie donc ce préfacteur et obtient finalement une expression très simple du facteur de transmission :

$$T = e^{-2qa}$$

On a réussi à calculer T dans le cas d'une barrière rectangulaire. Or, en pratique les barrières sont rarement rectangulaires. Nous allons voir comment calculer le coefficient de transmission lorsque le potentiel est plus compliqué.

II Radioactivité α

1) Présentation

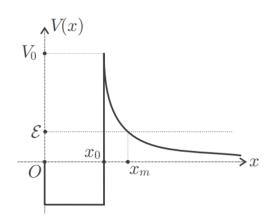
La radioactivité α consiste en l'émission d'un noyau d'hélium et d'un noyau fils à partir d'un noyau père : découvert au début du XXe siècle, elle reste inexplicable jusqu'en 1928. C'est Gamow qui parvient à l'expliquer en inventant à l'occasion l'effet tunnel. Pour cela, il fait l'hypothèse que la particule α et le noyau Y préexistent au sein du noyau père X. La particule α doit alors vaincre le potentiel coulombien d'interaction avec le noyau Y pour être émise. Classiquement, la particule α ne devrait pas être émise car la barrière de potentiel qu'elle doit passer est supérieure à l'énergie des particules α qui est mesurée.

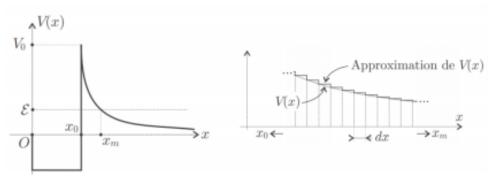
Application à la radioactivité alpha

$$_{Z}^{A}X \rightarrow _{2}^{4}He + _{Z-2}^{A-4}Y$$

$$V_o = \frac{2(Z-2)e^2}{4\pi\epsilon_o x_0} = 74 \text{ MeV}$$

$$E_{\alpha}$$
 = 4 MeV $< V_{\alpha}$





Par exemple, pour l'Uranium 238 (Z = 92, x_0 = 3,5 fm) :

$$V_o = \frac{2(Z-2)e^2}{4\pi\epsilon_o x_o} \simeq 74 MeV$$

Expérimentalement, on mesure 4 MeV pour la particule α .

Gamow a été le premier à imaginer que la particule α puisse traverser la barrière de potentiel par effet tunnel. On va suivre les traces du raisonnement de Gamow afin d'expliquer la radioactivité α .

2) Temps de demi-vie

La particule α doit traverser une barrière de potentiel coulombienne qui a une forme plus compliquée que la barrière de potentiel rectangulaire. Néanmoins, cette barrière a une forme régulière, et on peut découper cette barrière en barrières rectangulaires tout simplement avec la méthode des rectangles. Cherchons alors à calculer la probabilité P(x + dx) pour que la particule α traverse la barrière jusqu'à x + dx. Pour que la particule arrive jusqu'en x + dx, il faut qu'elle soit déjà arrivée jusqu'en x, puis il faut qu'elle réussisse à traverser la barrière de potentiel entre x et x + dx. Or cette barrière de largeur dx est rectangulaire et le coefficient de transmission vaut tout simplement (en négligeant le préfacteur):

T(x) = exp(-2q(x)dx), avec
$$q(x) = \frac{\sqrt{2m(V(x)-E)}}{\hbar}$$

Comme dx est petit, on peut développer T(x) à l'ordre 1 : T(x) = 1 - 2q(x)dx, P(x + dx) = P(x)T(x)

On effectue un développement de Taylor à l'ordre 1 de P, on obtient alors : $\frac{dP}{P} = -2q(x)dx$

On intègre cette expression entre le début et la fin de la barrière de potentiel et on obtient pour le coefficient de transmission de la barrière : $T = \frac{P(x_m)}{P(x_n)}$

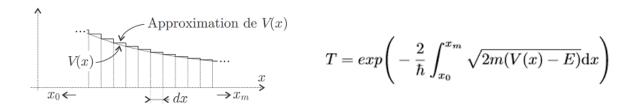
$$T = exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_{x_0}^{x_m} \sqrt{2m(V(x) - E)} dx\right)$$

Cette expression du coefficient de transmission peut être appliquée pour une barrière de potentiel quelconque (elle doit être néanmoins suffisamment régulière pour que le découpage en rectangles soit valable, mais en pratique ce sera toujours le cas). Dans notre cas, le potentiel considéré est le potentiel coulombien V(x) correspondant à l'interaction entre le noyau d'hélium et le noyau fils Y, il est donné par :

$$V(x) = \frac{K}{4\pi\varepsilon_0 x'}$$
 avec K = 2(Z – 2)e²

On remplace l'expression de V dans l'intégrale intervenant dans l'expression du coefficient de transmission, on intègre entre x_0 et x_m . On peut calculer l'intégrale analytiquement si la barrière est épaisse, en faisant tendre x_m vers l'infini (c'est bien le cas pour la radioactivité alpha). On obtient la loi de Gamow-Condon-Gurney, qui s'écrit :

$$ln(T) = a - \frac{b}{\sqrt{E}}$$



On considère une barrière épaisse et donc $x_m \rightarrow \infty$

$$\int_{x_0}^{x_m} \sqrt{\frac{x_m}{x} - 1} \, dx \approx x_m \left(\frac{\pi}{2} - 2\sqrt{\frac{x_0}{x_m}} \right) \qquad \ln(T) = a - \frac{b}{\sqrt{\mathcal{E}}}$$

Loi de Gamow-Condon-Gurney

Les expressions de a et b ne sont pas très intéressantes en soi, ce qui compte c'est la dépendance de ln(T) en fonction de E, car c'est ça qui intervient dans les résultats expérimentaux et c'est donc ça qui prouve que l'effet tunnel permet de décrire la radioactivité α . On peut enfin relier T au temps de demivie $\tau_{1/2}$ de la radioactivité (on doit passer par cette dernière étape car expérimentalement, c'est $\tau_{1/2}$ qui a été mesuré). Pour cela, il suffit de faire le raisonnement suivant : à l'intérieur du noyau, la particule α se cogne un certain nombre de fois à la barrière de potentiel avant de réussir à la traverser. Estimons d'abord le nombre de collisions par seconde. Pour cela, on suppose que l'on peut utiliser l'expression classique de l'énergie de la particule : $E_c = \frac{1}{2} m v^2$

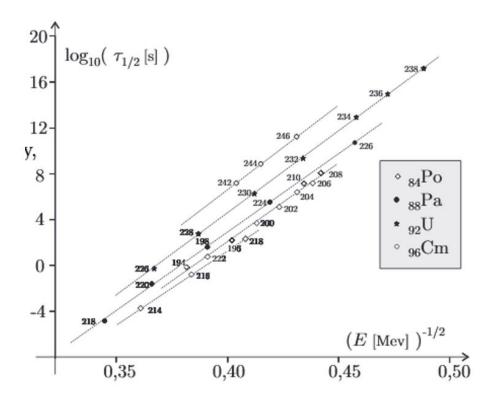
Le temps entre deux chocs est donc donné par $t_{chocs}=\frac{2x_0}{v}$. On en déduit que le nombre de chocs par unité de temps est $\frac{dN}{dt}=\frac{1}{t_{chocs}}$. La probabilité de désintégration du noyau est donc le produit du nombre de collisions par seconde et de la probabilité qu'une collision permette à la particule de traverser la barrière. Cette dernière est simplement le coefficient de transmission T calculé précédemment : $\lambda=\frac{T}{t_{chocs}}$

Si on note M(t) le nombre de noyaux à l'instant t, on fait l'hypothèse que la variation dM du nombre de noyaux est proportionnelle aux nombre de noyaux à l'instant t (autrement dit on fait l'hypothèse d'un ordre 1) : dM = $-\lambda$ M(t)dt, ce qui conduit à $M(t) = M(0)e^{-\lambda t}$

Le temps de demi-vie est donné par : $\tau_{1/2}=\frac{\ln{(2)}}{\lambda}$ (comme en chimie pour une réaction d'ordre 1), ainsi :

$$ln(\tau_{1/2}) = ln(ln(2)) - ln(\frac{T}{t_{chocs}}) = ln(ln(2)) + ln(t_{chocs}) - a + \frac{b}{\sqrt{E}}$$

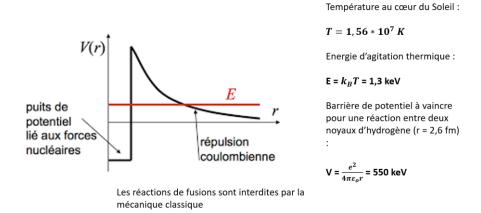
On voit que t_{chocs} dépend aussi de E, mais on ignore cette dépendance car elle fait intervenir ln(E), dont la variation est probablement négligeable devant la variation de $\ln(\tau_{1/2})$ due au terme en $\frac{1}{\sqrt{E}}$. Finalement, au détail précédent près, on trouve bien une dépendance affine de $\ln(\tau_{1/2})$ en fonction de $\frac{1}{\sqrt{E'}}$ ce qui confirme que l'effet tunnel c'est pas de la flûte !



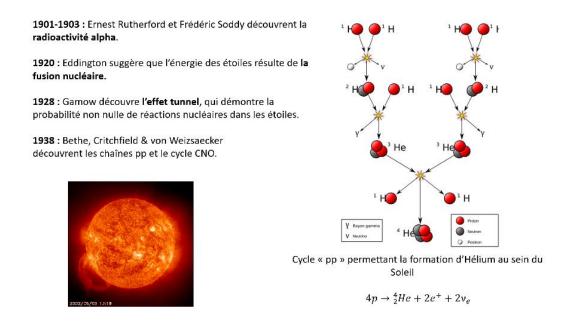
La loi de Geiger-Nuttall (1911)

L'effet tunnel intervient dans les processus radioactifs en général et par exemple dans les réactions de fusion, qui ont lieu dans le cœur des étoiles. Le problème de la vie des étoiles est un problème qui a été résolu tardivement (en 1938, par Bethe, entre autres). On se doutait que les étoiles tiraient leur énergie des réactions de fusion mais on ne pouvait pas expliquer classiquement comment celles-ci pouvaient démarrer. En effet, au cœur du Soleil, il fait très chaud ($T = 10^7$ K) mais pas assez chaud par exemple pour que deux noyaux d'hydrogène puissent espérer se rencontrer et déclencher des réactions de fusion. En effet, si on calcule la barrière coulombienne entre deux protons à une distance de r = 2,6, on trouve $V_0 = 553$ keV.

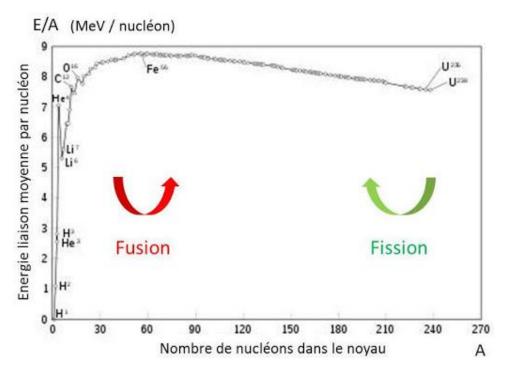
Une barrière coulombienne infranchissable?



L'énergie d'agitation thermique est quant à elle de l'ordre de $k_BT = 1$, $3keV < V_0$. C'est donc grâce à l'effet tunnel que ces réactions ont lieu. On a ainsi pu expliquer par exemple la phase dite de « séquence principale » d'une étoile durant laquelle elle consomme de l'hydrogène pour former de l'hélium. Il existe plusieurs chaînes de réactions conduisant de l'hydrogène à l'hélium, la chaîne « pp » comme proton-proton (en réalité il y a 4 sous catégories de chaînes pp) et le cycle CNO qui fait intervenir des réactions de fusion de l'hydrogène avec du carbone, de l'azote et de l'oxygène.



Pour information, l'étoile continue sa vie en brûlant l'hélium en carbone, puis le carbone brûle à son tour en oxygène, etc... L'étoile fusionne aux éléments lourds jusqu'au fer (certaines s'arrêtent avant mais on va faire simple). La fusion du fer nécessite de l'énergie contrairement aux éléments plus légers, les processus de fusion au cœur de l'étoile s'arrêtent, l'étoile n'a plus d'énergie pour lutter contre la gravité, elle va s'effondrer sur elle-même!



Conclusion

L'effet tunnel a de nombreuses applications : le microscope à effet tunnel (permet de faire la topographie de surfaces métalliques avec une résolution latérale de 1 Å et une résolution verticale de 0,1 Å), détection de la molécule d'ammoniac dans le milieu interstellaire, réalisation d'un maser (qui a permis à Penzias et Wilson de détecter accidentellement le rayonnement fossile à 3 K).

Bibliographie

- -http://ressources.univ-lemans.fr/AccesLibre/UM/Pedago/physique/02/divers/qbarr.html
- -BUP n°699 (microscope à effet tunnel)
- -Mines PC 2016
- -Centrale PC 2016
- -Basdevant et Dalibard