

XXIII

Particule dans un potentiel constant par morceaux - étude des états stationnaires



FIGURE XXIII.1 – Puce de silicium visualisée à l'aide d'un microscope à effet tunnel.

PLAN DU CHAPITRE

I	Position du problème	3
I.1	Particule face à un potentiel : premier exemple de la jonction PN	3
I.2	La modélisation en marche de potentiel - problématique	4
II	Etude complète des états stationnaires de la particule pour la marche de potentiel	5
II.1	Equation de Schrödinger indépendante du temps	5
	a - Etablissement	5
	b - Conditions de raccordement (***)	5
II.2	Cas $E > V > 0$: probabilité de transmission et réflexion	5
	a - Résolution complète par morceaux	6
	b - Exploitation du "raccordement"	7

	c - Coefficients de transmission et réflexion de courant de probabilité	8
II.3	Cas $0 < E < V$: onde évanescence	9
	a - Résolution complète	9
	b - Coefficients de transmission et réflexion - réflexion totale	10
	c - Quelques ordres de grandeurs pour δ	11
II.4	Simulations	11
III	Franchissement d'une barrière finie de potentiel dans le cas $E < V$: l'effet tunnel	11
III.1	Situation du problème - intérêt	11
III.2	Principe de résolution par morceaux	12
III.3	Raccordement - coefficient de transmission	13
III.4	Cas limite $E \ll V$ - exemple d'exploitation - ordres de grandeur	14
III.5	Exemples d'applications de l'effet tunnel	16

I Position du problème

I.1 Particule face à un potentiel : premier exemple de la jonction PN

HYPOTHÈSE : on limite là-encore notre étude au cas 1D de particules évoluant selon un axe $(x'x)$.

Dans de nombreux cas physiques, une particule libre, donc plongée dans un potentiel nul ($V=0$) sur un certain domaine d'espace, peut pénétrer dans une zone où s'exerce sur elle une force conservative, entraînant de fait une valeur d'énergie potentielle non nulle positive $V > 0$.

EXEMPLE : la jonction P-N (diode), qui correspond à la mise en contact de deux matériaux de propriétés électriques différentes :

- ⎧ l'un dit "dopé P" riche en porteurs de charge $q = +e > 0$ appelés "trous"
- ⎧ l'autre dit "dopé N" riche en porteurs de charge $q = -e < 0$

NB : QUELQUES PRÉCISIONS SUR LES DOPAGES N ET P EN LIVE AVEC LES CAS DU BORE ET L'ARSENIC!!!

Cette situation de déséquilibre des concentrations entre trous et électrons de part et d'autre de la jonction provoque une **diffusion des particules** vers leur zone de plus faible concentration \Rightarrow

- diffusion des particules de charge négative (électrons) de la zone N vers la zone P.
- diffusion des particules de charge positive (trous) de la zone P vers la zone N.

CONSÉQUENCE : cette zone limitée de redistribution des charges, dite zone de "déplétion", est siège d'un champ électrique $\vec{E} = -\frac{dV}{dx} \cdot \vec{e}_x$ et donc du potentiel $V(x)$ dont l'allure est précisée ci-dessous :

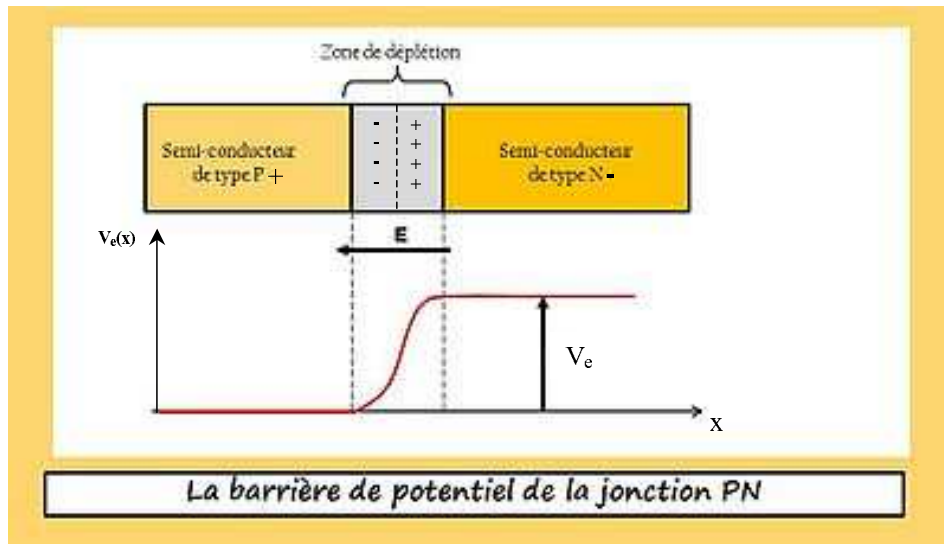


FIGURE XXIII.2 – Jonction PN : les particules N ou P sont face à une "marche" de potentiel

COMMENTAIRES :

- Les porteurs de charge positifs (trous) de la zone P qui diffusent spontanément vers la zone N sont

soumis à une force électrique $\vec{F}_+ = +e\vec{E}$, les ramenant vers la zone $P \Rightarrow$ ils sont donc face à un **"mur" d'énergie potentielle** $V = e(V_N - V_P) = eV_e$

- Les porteurs de charge négatifs (électrons) de la zone N qui diffusent spontanément vers la zone P sont soumis à une force électrique $\vec{F}_- = -e\vec{E}$, les ramenant vers la zone $N \Rightarrow$ ils sont donc face à un **"mur" d'énergie potentielle** $V = -e \times (V_P - V_N) = eV_e$ (donc idem situation des trous)

Autres exemples :

- "mur" de potentiel rencontré par l'électron d'un conducteur à la frontière de celui-ci : l'électron est quasi-libre de se déplacer dans le conducteur, mais voit une "frontière" de potentiel pour s'extraire de celui-ci.
- Interaction entre un neutron et un noyau atomique : l'interaction est nulle à grande distance et rapidement très forte à faible distance ($\sim 10^{-15}m$). Le neutron voit là-aussi une "frontière" potentiel.
- Radioactivité α et microscope à effet Tunnel : cf approche documentaire en fin de chapitre.

I.2 La modélisation en marche de potentiel - problématique

Dans toute la suite consacrée à l'étude du comportement des particules face à une barrière de potentiel, on retiendra la modélisation suivante dite "en marche" de potentiel" en $x = 0$:

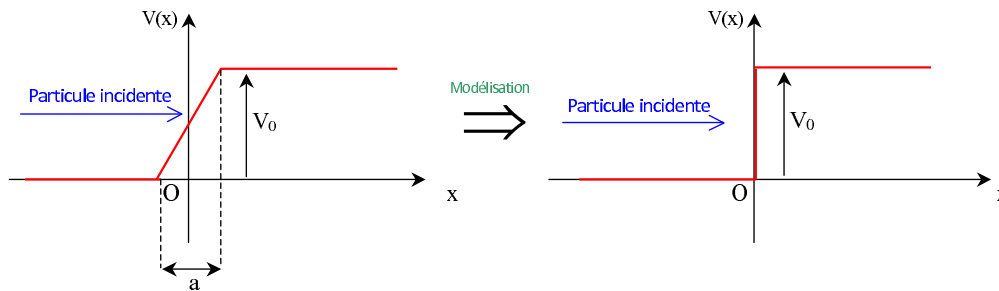


FIGURE XXIII.3 – Modélisation en "marche" de potentiel

CONDITION DE VALIDITÉ DU MODÈLE : pour la particule incidente sur la zone de haut potentiel, la "pente" de la marche doit être imperceptible pour la particule qui incide sur la barrière $\Rightarrow \lambda_{ODDB} \gg a$

Exercice de cours: (I.2) - n° 1. Montrer que la condition précédente impose à l'énergie cinétique de la particule incidente de ne pas dépasser une valeur que l'on précisera en fonction de m , h (cste de Planck), et a .

ANALYSE DU COMPORTEMENT DE LA PARTICULE D'UN POINT DE VUE CLASSIQUE :

L'énergie de la particule est $E = E_c + V(x)$ donc son énergie cinétique s'écrit dans les deux domaines d'espace :

$$\left[\begin{array}{l} \forall x < 0 \Rightarrow E_c = E > 0 \\ \text{et} \\ \forall x \geq 0 \Rightarrow E_c = E - V_0 \text{ ce qui impose } E > V \text{ pour assurer } E_c > 0 \end{array} \right.$$

CONSÉQUENCE : si $E < V_0$ alors dans une vision "classique" du problème, la particule ne peut pénétrer dans la marche de potentiel.

QUESTION : que devient cette analyse dans une approche quantique du problème, naturellement plus adaptée pour décrire le comportement d'une particule microscopique ?

II Etude complète des états stationnaires de la particule pour la marche de potentiel

II.1 Equation de Schrödinger indépendante du temps

a - Etablissement

On recherche les états stationnaires de la particule, soit des fonctions d'onde de forme : $\psi(x, t) = \varphi(x) \cdot \chi(t) = \varphi(x) \cdot e^{-j\frac{E}{\hbar}t}$

L'équation de Schrödinger indépendante du temps régissant l'évolution de la fonction d'onde spatiale de la particule s'écrit dans les deux domaines :

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m}\varphi''(x) = E \cdot \varphi(x) & \forall x < 0 \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\varphi''(x) + V \cdot \varphi(x) = E \cdot \varphi(x) & \forall x \geq 0 \end{cases}$$

b - Conditions de raccordement (***)

La résolution de cette équation d'ordre 2, dont la solution est unique, nécessite deux conditions physiques. Ce sont les conditions de **raccordement** :

- $\varphi(x)$ est par définition continue (doit forcément être de classe \mathcal{C}^2) (cf chap. XXI) $\Rightarrow \varphi(x = 0^-) = \varphi(x = 0^+)$
- $\varphi'(x)$ est continue $\Rightarrow \varphi'(x = 0^-) = \varphi'(x = 0^+)$

DÉMONSTRATION DE LA CONTINUITÉ DE $\varphi'(x)$ EN $x = 0$:

Reprenons l'équation de Schrödinger indépendante du temps et intégrons-la entre les positions $x_- = 0^-$ et $x_+ = 0^+$ contenant la discontinuité :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi''(x) + V \cdot \varphi(x) = E \cdot \varphi(x) \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \overbrace{\int_{0^-}^{0^+} \varphi''(x) \cdot dx}^{=\varphi'(0^+) - \varphi'(0^-)} + \underbrace{\int_{0^-}^{0^+} V \cdot \varphi(x) \cdot dx}_{\rightarrow 0} = E \underbrace{\int_{0^-}^{0^+} \varphi(x) \cdot dx}_{\rightarrow 0}$$

d'où l'on déduit finalement : $\varphi'(x = 0^-) = \varphi'(x = 0^+)$

II.2 Cas $E > V > 0$: probabilité de transmission et réflexion

NB : dans le cas d'une particule classique d'énergie E vérifiant $E > V > 0$, celle-ci franchit la marche, et sans "rebond". La suite propose une approche quantique de ce problème.

a - Résolution complète par morceaux

HYPOTHÈSE : on suppose une particule arrivant du domaine $x < 0$:

- RÉGION $x < 0$:

Dans la région $x < 0$ l'équation de Schrödinger indépendante du temps est : $\varphi''(x) + \frac{2mE}{\hbar^2}\varphi(x) = 0$
dont les solutions s'écrivent :

$$\varphi(x < 0) = Ae^{+j\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}x} + Be^{-j\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}x}$$

d'où l'on tire la fonction d'onde complète de l'état stationnaire :

$$\psi(x < 0, t) = Ae^{+j\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}x - \frac{E}{\hbar}t\right)} + Be^{-j\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}x + \frac{E}{\hbar}t\right)}$$

On rappelle par ailleurs (chapitre XXI) que le nombre d'onde et la pulsation de la fonction d'onde de l'état stationnaire d'énergie E s'écrivent :

$$\begin{cases} k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \\ \omega = \frac{E}{\hbar} \end{cases}$$

la fonction d'onde s'écrit donc :

$$\psi(x < 0, t) = \underbrace{Ae^{+j(kx - \omega t)}}_{\text{ODDB } x \uparrow} + \underbrace{Be^{+j(-kx - \omega t)}}_{\text{ODDB } x \downarrow}$$

INTERPRÉTATION : le domaine $x < 0$ est donc le siège d'une ODDB se déplaçant vers x croissant et également une ODDB se déplaçant vers x décroissant ; cette dernière implique l'existence d'une onde réfléchie dans ce domaine dans le cas quantique. Les conditions de continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée, appelées **conditions de raccordement** vont permettre de préciser l'amplitude de cette dernière.

- RÉGION $x > 0$:

L'équation de Schrödinger indépendante du temps est alors : $-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi''(x) + V\varphi(x) = E\varphi(x)$
soit :

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

de solutions :

$$\varphi(x > 0) = Ce^{+j\sqrt{\frac{2m(E - V)}{\hbar^2}}x} + De^{-j\sqrt{\frac{2m(E - V)}{\hbar^2}}x}$$

soit la solution complète :

$$\psi(x > 0, t) = C e^{+j \left(\sqrt{\frac{2m(E-V)}{\hbar^2}} x - \frac{E}{\hbar} t \right)} + D e^{+j \left(-\sqrt{\frac{2m(E-V)}{\hbar^2}} x - \frac{E}{\hbar} t \right)}$$

En outre, on peut calculer le nombre d'onde k_1 de la particule pour $x > 0$:

$$E_c = \frac{p^2}{2m} = E - V_0 \Rightarrow \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} = E - V_0 \Rightarrow k_1 = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}}$$

On a donc :

$$\begin{cases} k_1 = \sqrt{\frac{2m(E - V)}{\hbar^2}} \\ \omega = \frac{E}{\hbar} \end{cases}$$

Avec ces notations, la fonction d'onde s'écrit finalement :

$$\psi(x, t) = \underbrace{C e^{+j(k_1 x - \omega t)}}_{\text{ODDB } x \uparrow} + \underbrace{D e^{+j(-k_1 x - \omega t)}}_{\text{ODDB } x \downarrow}$$

La solution est là encore une superposition de 2 ODDB l'une progressive vers $x \uparrow$ et l'autre rétrograde vers $x \downarrow$

mais la particule arrivant du domaine $x < 0$, on peut exclure la contribution rétrograde dans la solution $D = 0$ (la source de la particule se trouve dans le domaine $x < 0$ et "tire" celle-ci vers x croissant) :

$$\boxed{\psi(x > 0, t) = C e^{+j(k_1 x - \omega t)}}$$

BILAN DE SITUATION :

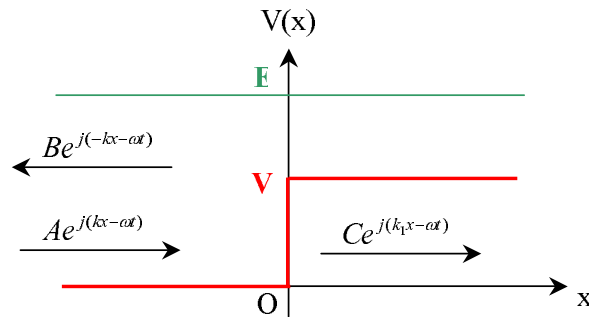


FIGURE XXIII.4 – Situation des différentes ODDB face et au delà de la marche de potentiel dans le cas $0 < V < E$

b - Exploitation du "raccordement"

- Condition de continuité de $\varphi(x)$ en $x=0$: $\psi(x = 0^-, t) = \psi(x = 0^+, t) \Rightarrow A + B = C$
- Condition de continuité de $\varphi'(x)$ en $x=0$: $\frac{\partial \psi}{\partial x}(x = 0^-, t) = \frac{\partial \psi}{\partial x}(x = 0^+, t) \Rightarrow k(A - B) = k_1 C$

Ce système est à deux équations et 3 inconnues (A,B,C) \Rightarrow l'une des inconnues doit être posée arbitrairement. Choisissons d'exprimer B et C en fonction de A puisqu'elle représente l'amplitude de probabilité de la particule incidente qui est censé être connue. On trouve alors :

$$\begin{cases} C = \frac{2}{\frac{k_1}{k} + 1} \cdot A = \frac{2k}{k_1 + k} \cdot A \\ B = C - A = \left(\frac{2k}{k_1 + k} - 1 \right) \cdot A = \frac{k - k_1}{k + k_1} \cdot A \end{cases}$$

c - Coefficients de transmission et réflexion de courant de probabilité

L'analogie profonde entre les OPPH électromagnétiques et les ODDB (ondes de matière) incite naturellement à définir des coefficients de transmission et réflexion.

Cependant, en mécanique ondulatoire seuls la densité de probabilité de présence et le courant de probabilité ont une signification physique ; on définit donc :

$$\begin{cases} \text{le coefficient de réflexion en probabilité : } R = \frac{\|\vec{J}_r\|}{\|\vec{J}_i\|} \\ \text{le coefficient de transmission en probabilité : } T = \frac{\|\vec{J}_t\|}{\|\vec{J}_i\|} \end{cases}$$

or (cf chap.XXI IV.5.) le courant de probabilité d'une ODDB permet de définir :

$$\vec{J} = |\psi(x,t)|^2 \cdot \frac{\hbar}{m} \vec{k} \Rightarrow \begin{cases} \vec{J}_i = |\psi_+(x < 0, t)|^2 \frac{\hbar k}{m} \cdot \vec{e}_x = |A|^2 \frac{\hbar k}{m} \cdot \vec{e}_x \\ \vec{J}_r = -|\psi_-(x < 0, t)|^2 \frac{\hbar k}{m} \cdot \vec{e}_x = -|B|^2 \frac{\hbar k}{m} \cdot \vec{e}_x \\ \vec{J}_t = |\psi_-(x > 0, t)|^2 \frac{\hbar k_1}{m} \cdot \vec{e}_x = |C|^2 \frac{\hbar k_1}{m} \cdot \vec{e}_x \end{cases}$$

donc finalement :

$$\begin{cases} R = \frac{\|\vec{J}_r\|}{\|\vec{J}_i\|} = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left(\frac{k - k_1}{k + k_1} \right)^2 \\ T = \frac{\|\vec{J}_t\|}{\|\vec{J}_i\|} = \frac{4kk_1}{(k + k_1)^2} \end{cases}$$

COMMENTAIRES IMPORTANTS :

- Dans un comportement classique, les particules frappant la marche **doivent toutes franchir celle-ci** avec une énergie cinétique résiduelle $E_c = E - V > 0$. Le phénomène de réflexion n'existe donc pas dans le cas classique.

\longrightarrow la réflexion de particules d'énergie $E > V$ est un phénomène **purement quantique**

- On vérifie immédiatement que $R + T = 1$ donc $|\vec{J}_i| = |\vec{J}_r| + |\vec{J}_t|$ relation traduisant **la conservation des particules**.
- Si $E \gg V$ alors $k_1 \simeq k$ et le comportement des particules quantiques se rapproche de celui des particules classiques avec $R \rightarrow 0$ et $T \rightarrow 1$.
- **Il se produit un phénomène d'interférences quantiques dans la région $x < 0 \Rightarrow$ EN LIVE!**

II.3 Cas $0 < E < V$: onde évanescente

a - Résolution complète

On s'intéresse désormais au cas d'une particule dont l'énergie mécanique est inférieure à la hauteur de la marche de potentiel.

- RÉGION $x < 0$:

La résolution est exactement identique à celle du cas $E > V > 0$, on a donc :

$$\varphi(x) = Ae^{+jkx} + Be^{-jkx} \quad \text{avec } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

et la fonction d'onde complète de l'état stationnaire :

$$\psi(x < 0, t) = \underbrace{Ae^{+j(kx - \omega t)}}_{\text{ODDB } x \uparrow} + \underbrace{Be^{+j(-kx - \omega t)}}_{\text{ODDB } x \downarrow}$$

- RÉGION $x > 0$:

L'équation de Schrödinger indépendante du temps devient :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + V \cdot \varphi(x) = E \cdot \varphi(x)$$

soit :

$$\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} - \kappa^2 \cdot \varphi(x) = 0 \quad \text{en posant } \kappa = \sqrt{\frac{2m(V - E)}{\hbar^2}}$$

dont la solution s'écrit :

$$\varphi(x) = C \cdot e^{\kappa x} + D \cdot e^{-\kappa x}$$

et finalement une onde complète :

$$\psi(x, t) = C \cdot e^{\kappa x} \cdot e^{-j\omega t} + D \cdot e^{-\kappa x} \cdot e^{-j\omega t}$$

CL : la fonction d'onde ne pouvant diverger lorsque $x \rightarrow \infty$, on a nécessairement $C = 0$, donc :

$$\psi(x, t) = D \cdot e^{-\kappa x} \cdot e^{-j\omega t}$$

COMMENTAIRES :

- ◇ Cette onde est non propagative et **évanescence**.
- ◇ Le comportement de l'onde de matière est analogue à celui d'un OPPH dans le domaine d'opacité d'un plasma (cf. chap.XVI). La distance caractéristique d'atténuation est $\delta = \frac{1}{\kappa}$.

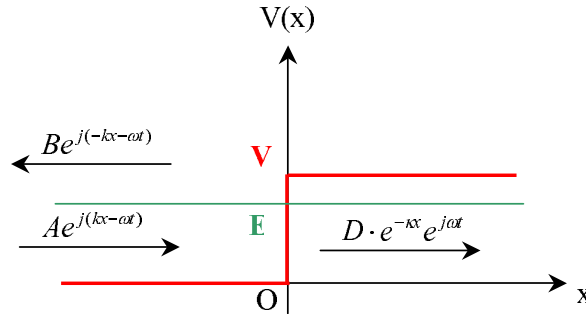


FIGURE XXIII.5 – Situation des différentes ODDB face et au delà de la marche de potentiel pour $0 < E < V$

SCHÉMA DE SITUATION :

b - Coefficients de transmission et réflexion - réflexion totale

Les conditions de raccordement permettent de dégager les relations suivantes entre les constantes d'amplitude de fonctions d'onde :

$$\left[\begin{array}{l} A + B = D \\ jk(A - B) = -\kappa \cdot D \end{array} \right. \quad \text{qui donne :} \quad \left[\begin{array}{l} B = \frac{k - j\kappa}{k + j\kappa} A \\ D = \frac{2k}{k + j\kappa} A \end{array} \right.$$

et qui permet là-encore de construire les coefficients de réflexion et de transmission du courant de probabilité :

$$\left[\begin{array}{l} R = \frac{||\vec{J}_r||}{||\vec{J}_i||} = \frac{|B|^2}{|A|^2} = 1 \\ T = 1 - R = 0 \end{array} \right.$$

INTERPRÉTATION PHYSIQUE :

Supposons un coefficient $A \in \mathbb{R}^{+*}$, ce qui n'a rien de choquant !! (on suppose simplement que l'ODDB associée à la particule incidente comporte un déphasage nul en $x = 0$ pour $t = 0$, et une amplitude de fonction d'onde $|A|$ non nulle).

- $R = 1 \Rightarrow$ "réflexion totale"¹
- $T = 0 \Rightarrow$ pas de transmission d'ODDB vers $x > 0$.

1. à rapprocher des prévisions classiques.

- Mais fonction d'onde non nulle dans la zone $x > 0$ classiquement interdite (puisqu'elle correspondrait à une particule d'énergie cinétique négative) \Rightarrow **profondeur de pénétration $\delta \sim \frac{1}{\kappa}$ dans la marche \Rightarrow possibilité de "franchir quantiquement" une barrière d'épaisseur $\sim \delta$: c'est l'effet tunnel (cf III)**
- $B \in \mathbb{C} \Rightarrow$ **un certain déphasage apparaît pour l'onde réfléchie en raison de la pénétration de la particule dans la marche. Cet effet est analogue à la réflexion métallique des ondes électromagnétiques, mais ne connaît pas d'équivalent en mécanique classique.**
- Dans le cas $V \gg E$ on a $\kappa \rightarrow \infty \Rightarrow$ **l'amplitude de l'onde évanescence est nulle $D = 0$ et $B = -A$ (déphasage de π à la réflexion).**

c - Quelques ordres de grandeurs pour δ

- grain de poussière de masse $m = 1.10^{-10} \text{ kg}$ de vitesse $v = 1 \text{ mm.s}^{-1}$ face à une marche de potentiel $V = 2 \cdot E_c(\text{grain})$: $\delta = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V-E)}} = \frac{\hbar}{mv} = 1,05.10^{-21} \text{ m}$ valeur insignifiante pour le grain de poussière.
- électron de conduction dans un cristal de cuivre, sachant que l'arrachement (effet photoélectrique) se produit à partir de $\lambda < \lambda_s = 0,29 \text{ }\mu\text{m}$. Dans le cas limite $\lambda = \lambda_s$, on a :

On a : $V - E = \frac{hc}{\lambda_s}$
soit :

$$\delta = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V-E)}} = \hbar \sqrt{\frac{\lambda_s}{2mhc}} = \sqrt{\frac{h\lambda_s}{8\pi^2 mc}} = 9,4.10^{-11} \text{ m} \sim 10^{-10} \text{ m}$$

Cette valeur est de l'ordre des distances interatomiques

II.4 Simulations

\Rightarrow **cf simulation marche de potentiel.**

III Franchissement d'une barrière finie de potentiel dans le cas $E < V$: l'effet tunnel

III.1 Situation du problème - intérêt

QUESTION : Que se passe-t-il pour une particule incidente si nous "limitons" l'épaisseur L de la marche de potentiel à une valeur comparable à δ , on parle alors de **barrière d'épaisseur finie de potentiel**, dans le cas d'ondes de matière évanescences, soit $E < V$?

RÉPONSE "INTUITIVE" NATURELLE : possibilité de franchissement de cette dernière par la particule puisque l'amplitude de probabilité n'est pas nulle en bout de barrière $L \sim \delta$ et par conséquent la densité de probabilité de présence non plus \Rightarrow c'est **l'effet tunnel**.

NB : cet effet est intrinsèquement quantique. Aussi les situations décrites sur les illustrations suivantes sont non réalistes :

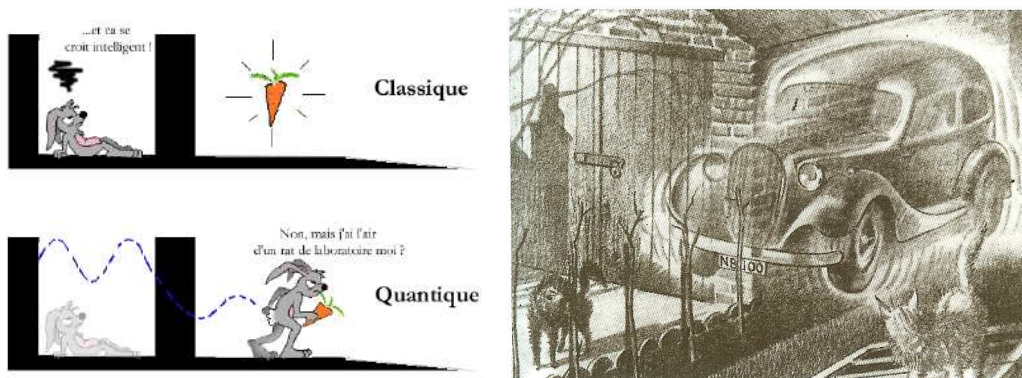


FIGURE XXIII.6 – Deux illustrations : la gourmandise d'un lapin satisfaite par effet tunnel - véhicule s'échappant de son garage par effet tunnel (illustration *Les Aventures de M. Tompkins* de George Gamow publiées entre 1940 et 1945) \Rightarrow situations impossibles

INTÉRÊT : dans certaines situations physiques, l'effet tunnel est "à l'oeuvre". C'est par exemple le cas pour :

- Oscillation de l'atome d'azote N dans la molécule d'ammoniac $NH_3 \Rightarrow$ cf chapitre XXIII
- Diode à effet Josephson
- Radioactivité $\alpha \Rightarrow$ cf plus bas *approche documentaire*
- Microscope à effet tunnel (Invention en 1981 et Prix Nobel 1986 pour Binnig et Rohrer. IBM) \Rightarrow cf plus bas dans ce cours et en *approche documentaire*

III.2 Principe de résolution par morceaux

La situation énergétique du problème est désormais la suivante :

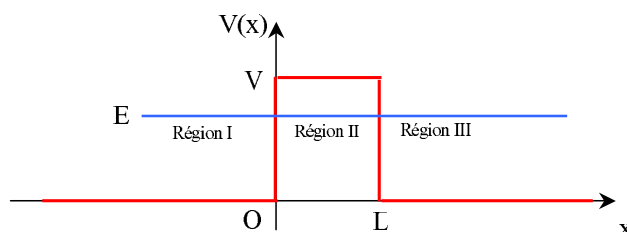


FIGURE XXIII.7 – Barrière de potentiel

La recherche des états stationnaires dans les 3 régions de l'espace se fait comme précédemment par résolution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps.

On peut facilement donner les expressions **génériques** que prend la partie spatiale $\varphi(x)$ de $\psi(x, t)$ dans les 3 régions en s'appuyant sur les calculs vus plus haut ; ainsi :

$$\left[\begin{array}{l} \text{region I : } \varphi(x) = A_1 \cdot e^{jkx} + B_1 \cdot e^{-jkx} \\ \text{region II : } \varphi(x) = C_2 \cdot e^{\kappa x} + D_2 \cdot e^{-\kappa x} \\ \text{region III : } \varphi(x) = A_3 \cdot e^{jkx} + B_3 \cdot e^{-jkx} \end{array} \right.$$

avec toujours :
$$\begin{cases} k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \\ \kappa = \sqrt{\frac{2m(V-E)}{\hbar^2}} \end{cases}$$

en outre la particule est uniquement incidente depuis $x = -\infty$ donc pas de particule arrivant de $x = +\infty$
 $\Rightarrow B_3 = 0$

Le système est donc :

$$\begin{cases} \text{region I : } \varphi(x) = A_1 \cdot e^{jkx} + B_1 \cdot e^{-jkx} \\ \text{region II : } \varphi(x) = C_2 \cdot e^{\kappa x} + D_2 \cdot e^{-\kappa x} \\ \text{region III : } \varphi(x) = A_3 \cdot e^{jkx} \quad \text{une ODDB progressive } x \uparrow \text{ émerge de la barrière dans cette région} \end{cases}$$

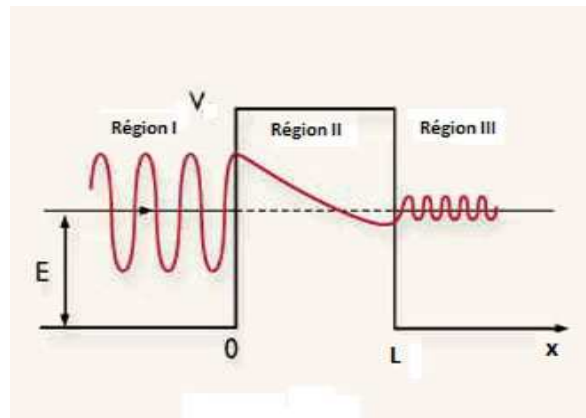


FIGURE XXIII.8 – Effet tunnel : la particule incidente (ODDB incidente arrivant de $-\infty$ en région I) traverse la barrière et une ODDB naît en région III.

III.3 Raccordement - coefficient de transmission

Les conditions de raccordement pour $\varphi(x)$ et $\varphi'(x)$ entre les trois régions donnent :

$$\text{Continuité de } \varphi(x) : A_1 + B_1 = C_2 + D_2 \quad (1) \quad \text{et} \quad A_3 e^{jkL} = C_2 \cdot e^{\kappa L} + D_2 \cdot e^{-\kappa L} \quad (2)$$

et

$$\text{Continuité de } \varphi'(x) : jk(A_1 - B_1) = \kappa(C_2 - D_2) \quad (3) \quad \text{et} \quad jkA_3 e^{jkL} = \kappa(C_2 e^{\kappa L} - D_2 e^{-\kappa L}) \quad (4)$$

La résolution de ce système, triviale mais trop longue ne sera pas développée ici. On donne simplement la marche à suivre :

- En combinant (2) et (4) on tire les expressions de C_2 et D_2 en fonction de A_3
- Puis en combinant (1) et (3) on tire les expressions de A_1 et B_1 en fonction de C_2 et D_2 et donc en fonction de A_3 .

Dans cette étude, on s'intéresse au franchissement de la barrière par les particules ; on calcule donc le coefficient de transmission T défini par :

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

qui donne tous calculs fait :

$$T = \frac{4k^2\kappa^2}{4k^2\kappa^2 + (\kappa^2 + k^2)^2 \sinh^2 \kappa L}$$

soit finalement :

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

III.4 Cas limite $E \ll V$ - exemple d'exploitation - ordres de grandeur

CAS INTÉRESSANTS :

- Barrière très longue (épaisse) $L \gg \delta = \frac{1}{\kappa}$, alors :

$$T \simeq \frac{16E(V-E)}{V^2} e^{-2\kappa L}$$

- et si en plus la barrière est très haute (ou particule de très faible énergie) $V \gg E$, alors :

$$T \simeq \frac{16E}{V} e^{-2\sqrt{\frac{2mV}{\hbar^2}} L}$$

CONCLUSION :

Compte tenu de sa dépendance en $e^{-2\sqrt{\frac{2mV}{\hbar^2}} L}$, le coefficient de transmission diminue dans le cas d'une barrière épaisse et/ou haute.

QUELQUES ORDRES DE GRANDEURS :

L'effet tunnel est par exemple mis en oeuvre dans le **microscope à effet tunnel** (STM en anglais pour : Scanning Tunneling Microscope) inventé en 1981 par Binnig et Rohrer dans les laboratoires IBM ; cette découverte sera couronnée par l'obtention du Prix Nobel de physique en 1986. Le principe sera plus largement expliqué en *analyse documentaire*, mais disons simplement pour l'instant qu'il consiste à déplacer une pointe de canon à électrons au dessus d'un substrat à observer, et de faire passer les électrons entre cet émetteur et le substrat par effet tunnel. En imposant par asservissement la valeur du courant ainsi généré par variation de la distance entre la pointe émettrice et le substrat, et en déplaçant la pointe dans les deux dimensions du plan, on peut "cartographier" l'allure tridimensionnelle de l'échantillon avec une précision

redoutable (peut-on voir des atomes ??? réponse en AD!)

Fixons les ordres de grandeurs dans un tel problème :

Exercice de cours: (III.4) - n° 2. Le canon exploité, dit à effet de champ (FEG pour field effect gun), comporte une pointe en platine irradiée dont le travail d'extraction électronique $V = 2 \text{ eV}$ constitue la barrière de potentiel. Si l'on cherche à "voir" les atomes du substrat, il nous faut descendre à l'échelle atomique, soit $\sim 1 \text{ \AA}$. On doit donc imposer L autour de cette valeur. On supposera que les électrons possèdent une énergie de $E = 1 \text{ eV}$

Calculer le coefficient de transmission T :

- si le canon émet des électrons $m_e = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$
- si le canon émet des protons $m_p = 1,67 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$

Conclure.

RÉPONSE :

- CAS DES ÉLECTRONS :

Il faut faire attention de bien étudier numériquement si les conditions d'application des relations simplifiées de T ci-dessus sont exploitables :

$$\delta_e = \frac{1}{\kappa_e} = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m_e(V-E)}} = 1,95 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

ainsi $L \sim \delta$ et par ailleurs $E \sim V \Rightarrow$ aucune des deux formes simplifiées n'est utilisable dans le cas des électrons. On reviendra donc à l'expression exacte de T pour cet exercice.

$$T_e = \frac{4E(V-E)}{4E(V-E) + V^2 \sinh^2 \left(\sqrt{\frac{2m_e(V-E)}{\hbar^2}} L \right)} = 0,78 \Rightarrow \text{effet tunnel perceptible!!!}$$

- CAS DES PROTONS :

$$\delta_p = \frac{1}{\kappa_p} = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m_p(V-E)}} = 4,55 \cdot 10^{-12} \text{ m}$$

Ainsi, on peut exploiter la première relation simplifiée qui donne alors :

$$T_p \simeq \frac{16E(V-E)}{V^2} e^{-2\frac{L}{\delta_p}} \simeq 3,5 \cdot 10^{-19}$$

CONCLUSIONS :

- Le franchissement de la barrière par des protons est pratiquement impossible pour des distances de l'ordre atomique, ce qui n'est pas le cas pour des électrons, d'où le choix des concepteurs du STM d'opter pour ces derniers.
- A fortiori, l'effet tunnel ne se manifestera pas pour des objets macroscopiques ; la voiture sortant de son garage par effet tunnel restera définitivement l'un des songes de M. Tomkins!!!

III.5 Exemples d'applications de l'effet tunnel

Radioactivité α et microscopie à effet tunnel \Rightarrow **analyse documentaire**