

LP41 : Effet Tunnel

Niveau : L3

Biblio : « Mécanique quantique, tome I », Cohen-Tannoudji ; Site INSP-Jussieu ; « Mécanique quantique, tome 1 », Claude Aslangul

Prérequis : mécanique newtonienne, équation de Schrödinger, milieux dispersif et onde évanescence, électrostatique

Plan :

I. Modélisation du problème

1. Barrière de potentiel à une dimension
2. Analogie avec la physique classique
 - a) Avec la mécanique classique
 - b) Avec l'optique
3. Mise en équation
4. Probabilité de transmission

II. La Radioactivité α

1. Problématique
2. Modèle de Gamow

III. Microscope à effet tunnel

1. Principe de fonctionnement
2. Balayage
3. Spectroscopie

Introduction :

Si la mécanique newtonienne est un modèle marchant extrêmement bien pour des objets de tailles macroscopiques, voir mésoscopique, elle montre ses limites lorsque les objets sont de la taille des atomes et ne permet pas de décrire certains phénomènes. Cela provient du fait qu'elle ne prend pas en compte le caractère ondulatoire des particules, ce que fait par contre la mécanique quantique. Un exemple de phénomène où l'aspect ondulatoire de la particule joue un rôle fondamental et qui ne peut-être décrit pas la mécanique classique est l'effet tunnel, ce qui va être l'objet de notre leçon du jour.

Nous verrons dans quelles conditions on a un effet tunnel, son mécanisme et dans quelle application on peut utiliser ce phénomène quantique.

I. Modélisation du problème

1. Barrière de potentiel à une dimension

Voir « Mécanique quantique, tome I » chap I.D p24

Le comportement d'une particule dans l'espace et le temps est décrit par l'équation de Schrödinger que l'on applique à une fonction d'onde $\Psi(r,t)$, fonction d'onde correspondant à une amplitude de probabilité et servant à décrire l'état quantique d'un système.

Dans toute cette leçon nous utiliserons le cas. Nous nous placerons dans le cas où la particule est plongée dans une énergie potentielle $V(r)$ indépendant du temps, et nous intéresser aux états stationnaires de la particule, c'est-à-dire que nous aurons $\Psi(r,t) = \varphi(r)e^{-i\omega t}$.

Les états stationnaires ont l'avantage d'avoir des niveaux d'énergies bien définies $E = \hbar\omega$ (énergie propre correspondant aux états propres de la particule).

Dans ce cas l'équation de Schrödinger s'exprime de la façon suivante :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) \right] \varphi(\mathbf{r}) = E \varphi(\mathbf{r})$$

Pour mettre en évidence les phénomènes quantiques nous allons nous placer dans le cas de potentiels carrés => des potentiels variant notablement sur de faibles distances c'est-à-dire bien inférieure à la longueur d'onde de la particule (longueur de De Broglie).

Le modèle à une dimension permet de simplifier le problème => nous avons un ensemble de région où le potentiel est constant. C'est un cas idéal mais non réel car il n'est pas continu. Ici le potentiel variera selon x donc $V(r) = V(x)$.

Voir « Mécanique quantique, tome I » chap I.D p27-28

2. Analogie avec la physique classique

a) Avec la mécanique classique

Classiquement on a $E = E_c + E_p = \text{Cste}$ (si l'on ne garde que les forces conservatives)

Lorsque $E < V_0 \Leftrightarrow E_c < 0$ dans la barrière. La particule ne peut pas franchir la barrière de potentiel, il n'y a aucune transmission.

Lorsque $E > V_0 \Leftrightarrow E_c > 0$. La particule peut franchir la barrière et $T = 1$

b) Avec l'optique

Voir « Mécanique quantique, tome I » chap I.D p29

Faire une analogie avec l'optique devient beaucoup plus pertinent car l'aspect ondulatoire est pris en compte.

Analogie entre l'optique et la méca quantique, et analogie entre l'équation d'Alembert et celle de Schrödinger. Le problème de mécanique quantique est traité comme un problème de d'optique. Une variation de l'énergie $E-V$ sera assimilée à une variation d'indice d'un milieu transparent. Lorsque $E - V < 0 \Rightarrow$ onde évanescente.

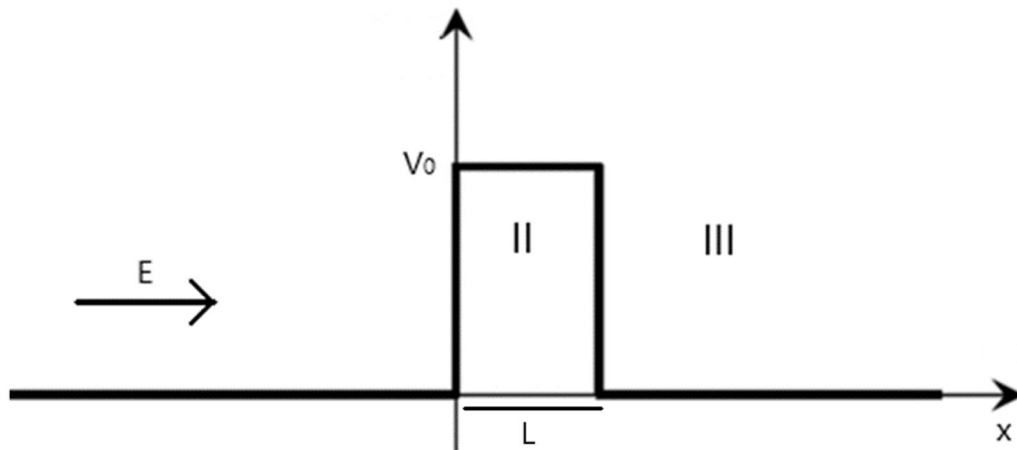
En méca quantique cela se traduit par une probabilité d'être réfléchi, et une probabilité d'être transmis si la barrière de potentiel n'est pas trop grande. Probabilité de présence derrière la barrière de potentiel. C'est l'**effet tunnel**.

3. Mise en équation

On reprend l'équation de Schrödinger :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) \right] \varphi(\mathbf{r}) = E \varphi(\mathbf{r})$$

On divise le milieu en 3 zones : I, II, III



L'équation de Schrödinger prend la forme :

Pour les zones I et III : $\frac{-\hbar^2}{2m} \cdot \varphi''_{I \text{ et } III}(x) - E \varphi_{I \text{ et } III}(x) = 0$

Pour la zone II : $\frac{-\hbar^2}{2m} \cdot \varphi''_{II}(x) + (V_0 - E) \varphi_{II}(x) = 0$

Avec $V_0 > E$

On en déduit la forme de $\varphi(x)$ dans les différentes régions :

On pose $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ ainsi que $K = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$

Dans I : $\varphi_I(x) = A.e^{ikx} + B.e^{-ikx}$

Dans II : $\varphi_{II}(x) = C.e^{Kx} + D.e^{-Kx}$

Dans III : $\varphi_{III}(x) = F.e^{ikx} + G.e^{-ikx}$

On suppose que la particule vient uniquement de la gauche vers la droite. On peut supprimer le terme : $G. e^{-ikx}$

Important : La fonction de Schrödinger est une équation du 2^{ème} ordre, le potentiel ne doit pas avoir de divergence, ou singularité, c'est-à-dire posséder une hauteur finie. La dérivée première ainsi que la fonction doit être continue lors du passage d'un domaine à l'autre on a :

$$\varphi_I(0) = \varphi_{II}(0) \text{ et } \varphi_{II}(L) = \varphi_{III}(L) \qquad \varphi_I'(0) = \varphi_{II}'(0) \text{ et } \varphi_{II}'(L) = \varphi_{III}'(L)$$

Enfin nous allons nous intéresser au terme $B. e^{-ikx}$ qui va correspondre à ce qui est réfléchi par la barrière de potentiel et à $F. e^{ikx}$ qui va correspondre à ce qui a réussi à traverser la barrière de potentiel.

4. Probabilité de transmission

Pour le coefficient de réflexion on a $R = \frac{|B|^2}{|A|^2}$ tandis que pour le coefficient de transmission $T = \frac{|F|^2}{|A|^2}$ avec $T+R = 1$. A partir des conditions de raccordement vu plus haut, et d'un calcul fastidieux qu'on passera, on donne la formule :

$$T = \frac{4E(V_0 - E)}{4E(V_0 - E) + V_0^2 \operatorname{sh}^2 \left[\sqrt{2m(V_0 - E)} l / \hbar \right]} = \frac{4E(V_0 - E)}{4E(V_0 - E) + V_0^2 \operatorname{sh}^2 \left[K \cdot l \right]}$$

On remarquera que l'on a 5 coefficients pour 4 équations. Sur le papier c'est un problème, néanmoins les fonctions étudiées sont non normalisables (pour le faire il faudrait que l'on ait un paquet constitué d'une somme d'exponentiels), on ne s'intéresse pas à trouver la valeur de ces coefficients mais à regarder la valeur du rapport de l'un sur l'autre.

La fonction sh^2 étant strictement croissante, T diminue lorsque $V_0 - E$ augmente ou lorsque la largeur de la barrière de potentiel l augmente.

En posant $\beta = \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)}$

Dans $\operatorname{sh}^2(x)$ si :

$x \rightarrow 0$ alors on a $\operatorname{sh}^2(x) \rightarrow x^2$, dans le cas d'une barrière de faible épaisseur. On a donc une évolution telle que $T \approx \frac{1}{1 + \beta \cdot (K \cdot l)^2}$

$x \rightarrow \infty$ alors $\operatorname{sh}^2(x) \rightarrow \frac{1}{4} e^{2x}$ (on rappelle $\operatorname{sh}(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{2}$) dans le cas d'une barrière épaisse.

On a donc $T \approx \frac{4}{\beta} \cdot e^{-2Kl}$. L'effet tunnel a donc une sensibilité évoluant de façon exponentielle donc importante.

Ici nous auront $\frac{1}{K}$ qui va correspondre à une grandeur caractéristique de la capacité de pénétration de la particule dans la barrière, et donc l'importance de l'effet tunnel. Lorsque l'on a $T \rightarrow 0$, l'énergie est réfléchi car $R \rightarrow 1$

La masse intervient également dans K , lorsque m augmente, K augmente et T diminue.

Faisons l'hypothèse que l'on a $V_0 = 2 \text{ eV}$, $E = 1 \text{ eV}$ et $l = 1 \text{ angström}$.

Pour un électron possédant une masse $m = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$ on a $T = 0,79$

Pour un proton possédant une masse $m = 1,67 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$ on a $T = 2,4 \cdot 10^{-19}$

Premier cas, on a $x \rightarrow 0$. Deuxième cas on a $x \rightarrow \infty$.

Un électron a donc $3,3 \cdot 10^{18}$ fois plus de chance de passer à chaque collision qu'un proton.

Pour un humain ou un objet du quotidien, les chances de traverser deviennent plus qu'insignifiantes.

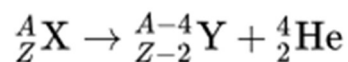
II. La radioactivité α

1. Problématique

Découverte par Ernest Rutherford en 1898, 2 ans seulement après la découverte de la radioactivité par Henri Becquerel, la radioactivité α est d'abord peu étudiée. La radioactivité β , où une particule, électron ou positron, est émise est plus simple à étudier car moins absorbée par la matière que ne peut l'être un rayonnement α .

Il fallut attendre 1909 que Rutherford et Geiger permette de déterminer que la particule α est un atome d'hélium vidé de ses charges négatives, c'est-à-dire un noyau d'hélium.

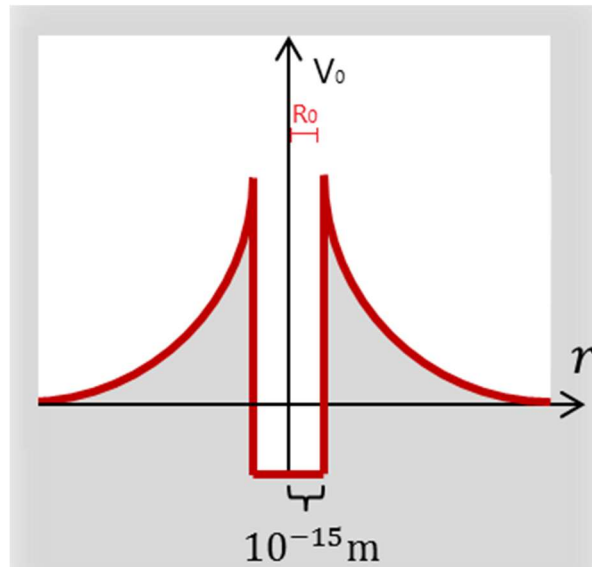
La réaction étant modélisée de la façon suivante :



Contrairement à la radioactivité β où il y a seulement une particule élémentaire légère qui est émise, on a ici l'émission d'une particule beaucoup plus massive, un morceau du noyau d'origine. On peut alors se demander de quelle manière cette particule arrive à vaincre l'interaction forte qui maintient la cohésion du noyau afin de se libérer de ce noyau.

2. Modèle de Gamow

En 1928, un jeune scientifique américano-russe utilise la toute nouvelle mécanique quantique afin de proposer une explication à la libération d'un noyau d'hélium lors d'une désintégration α . Il propose de modéliser l'atome comme un puit de potentiel entouré d'une barrière de potentiel de chaque côté. La barrière de potentiel représentant la répulsion électrostatique entre particule d'une même charge qui est complètement supplanté à courte distance par l'interaction forte qui assure le maintien du noyau. Le franchissement de la barrière signifiant que l'on parvient à vaincre cette interaction forte. Ensuite au fur et à mesure que l'on s'éloigne la répulsion électrostatique diminue. L'évolution du potentiel aurait donc l'allure suivante :



On considère que la particule α , qui est un ensemble stable, existe comme une particule individuelle à l'intérieur du noyau, que l'on peut visualiser comme un gaz rempli d'autre particule α et de neutron.

Pour trouver la valeur de la hauteur de la barrière électrostatique on calcule l'énergie de répulsion électrostatique qu'il faut vaincre.

Pour $r > R_0$, on a $V = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{(Z-2) \cdot e^2}{r}$

Pour $r < R_0$, $V < 0$

Avec R_0 compris entre 10^{-15} et 10^{-14} m.

Prenons le cas du radium, élément dont la découverte valut le prix Nobel de chimie à Marie Curie en 1911. On a $Z = 88$. Le rayon R_0 d'un noyau de radium 226 peut être estimé autour de

$$\sqrt[3]{226 \cdot 10^{-15}} = 6,1 \cdot 10^{-15} \text{ m. On a donc } V(R_0) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{(Z-2) \cdot e^2}{R_0} = 20,28 \text{ MeV}$$

Le noyau d'hélium aura une énergie cinétique autour de 5 MeV (soit environ $v = 15 \cdot 10^6$ m/s). L'énergie de la particule est bien trop faible pour franchir la barrière de potentiel, seul l'effet tunnel peut permettre à la molécule de sortir.

Chaque particule α subira des collisions avec les autres particules α ou des neutrons et des fois avec la barrière de potentiel.

2 cas se présentent alors, soit la particule rebondit contre la barrière, soit elle la traverse par effet tunnel et on a alors une désintégration du noyau.

Prenons le cas d'un échantillon de radium 226 pur de masse $m = 1$ g.

Pour qu'il y ait effet tunnel, la particule doit franchir la barrière de potentiel sur une distance suffisante pour que le potentiel de la barrière soit égal au maximum à 5 MeV. Cette distance

$R_c = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{(Z-2).e^2}{V(R_c)} = 24,7.10^{-15} \text{ m}$. La barrière commençant à $6,1.10^{-15} \text{ m}$ du centre du noyau, la distance à parcourir par effet tunnel est de $l = 18,6.10^{-15} \text{ m}$.

On peut alors calculer le taux de transmission T . On a $K = 1,74.10^{15}$, on en déduit le produit $K.l = 32,36$. On va donc considérer que $K.l \rightarrow \infty$ donc $T \approx \frac{4}{\beta} \cdot e^{-2Kl} = \frac{4}{1,35} \cdot e^{-2.32,36} = 2,31 \times 10^{-28}$.

Si la particule rebondit sur la paroi, elle va atteindre la paroi opposée et pourra, de nouveau, soit être transmise, soit rebondir... et ainsi de suite. La particule α parcourant $2R_0 = 12,2.10^{-15} \text{ m}$ à la vitesse de $v = 15.10^6 \text{ m/s}$, elle va rencontrer la barrière $1,23.10^{21}$ fois/s. Chaque particule aura donc $2,84.10^{-7}$ chance/s de traverser la paroi.

Dans un échantillon de 1 g de radium et pour $M_{Ra} = 226 \text{ g/mol}$, on a $2,66.10^{21}$ atomes de radium. En émettant l'hypothèse que chaque atome peut émettre une seule particule alpha, on peut estimer qu'il y aurait environ $3,28.10^{14}$ désintégrations α/s dans un échantillon de 1 g de radium pur au début de sa vie.

Ici le temps d'aller-retour des particules joue un rôle essentiel, bien le mettre en avant.

III. Application : Microscope à effet tunnel

1. Principe de fonctionnement

Inventé en 1981 par 2 chercheurs d'IBM, Gerd Binnig et Heinrich Rohrer, qui reçurent le prix Nobel de physique pour cette invention en 1986. Il fait partie de la catégorie des microscopes en champ proche c'est-à-dire détectant les ondes évanescentes par l'utilisation d'un pointeur qui va balayer la surface de l'échantillon analysé. Néanmoins cet échantillon doit forcément être de nature conductrice, donc métallique.

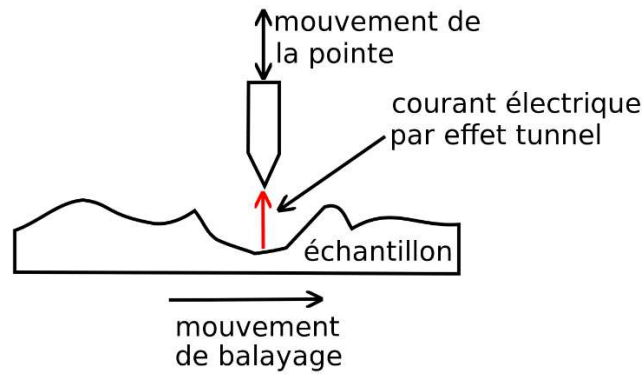
Les ondes évanescentes peuvent posséder un vecteur d'onde k_x plus grand ce qui selon le principe d'incertitude d'Heisenberg autorise de visualiser des détails (donc un Δx) plus petits.

Voir <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00274746/document> p13

Les ondes évanescentes étant situées à la surface de l'objet, il faut que l'on se place le plus proche possible de l'échantillon.

Ici ce n'est pas une onde évanescente que l'on va étudier mais des électrons qui vont franchir une barrière de potentiel avec un comportement similaire à une onde évanescente.

Le microscope va être composé d'un pointeur (ou sonde) qui suit la surface de l'objet. Ce pointeur est chargé, il se crée donc une tension entre la pointe de la sonde et l'échantillon. Entre la pointe et l'échantillon une couche de vide isolante est présente, constituant une barrière de potentiel. La tension exercée entre la pointe et l'échantillon est normalement trop faible pour permettre à un électron de traverser la couche de vide, la transmission se fait par effet tunnel. On a donc un courant électrique provenant uniquement de l'effet tunnel.



Principe de fonctionnement du microscope

La valeur de ce courant par effet tunnel étant sensible à une variation de l'épaisseur de la couche de vide, et ne dépendant que de celle-ci, on astreint le microscope à garder un courant constant. Lorsque le relief de l'échantillon varie, la pointe doit faire varier sa position en conséquence. On enregistre donc ces variations de la hauteur de la sonde afin de remonter au relief de l'échantillon.

On a donc le courant $I \propto T \approx \frac{4}{\beta} \cdot e^{-2\alpha l}$

La distance entre la pointe et l'échantillon est de l'ordre du dixième de l'Angström quant au courant il est de l'ordre du nA voir moins, ce qui nécessite une amplification du signal.

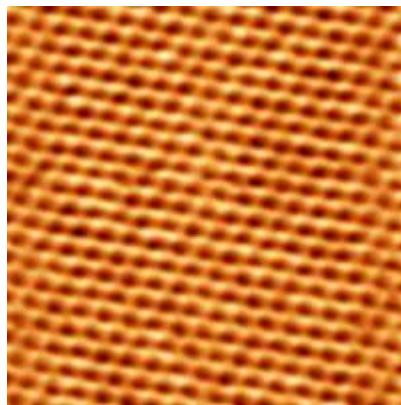


Image 4nm x 4nm montrant la résolution atomique d'une surface de graphite (HOPG) à température ambiante

2. Balayage

Le microscope va donc balayer l'échantillon sur une partie, ou toute, sa surface. L'appareil étant extrêmement sensible, il faut que la pointe soit très rigide, sans rugosité à sa surface. De plus il ne faut pas que des perturbations extérieures viennent perturber la mesure. Il faut donc un système d'amortissement afin de limiter le plus possible les variations externes, puisqu'une variation de l'ordre du dixième d'Angström suffit pour brouiller les résultats. Enfin il faut être capable de déceler la moindre infime variation de courant afin d'asservir l'appareil à un courant donné. On utilise des céramiques piezo-électriques afin d'avoir la

sensibilité nécessaire. Pour avoir une bonne sensibilité latérale, la pointe la plus fine possible est nécessaire (qq atomes)

3. Spectroscopie

On peut également utiliser le microscope à effet tunnel afin d'étudier les propriétés électroniques locales de l'échantillon. La conductance tunnel, définie comme la dérivée du courant tunnel par rapport à la tension appliquée est directement reliée à la densité d'états électroniques locale de la surface, densité d'état dépendant directement de la nature des atomes s'y trouvant.

On essaye de faire la mesure à température nulle afin de ne pas prendre en compte les excitations thermiques pouvant perturber la mesure (l'énergie pour franchir la barrière pour un électron d'un élément donné ne serait plus la même).

On a donc accès à la structure de bande donc à la nature de l'échantillon.

Le microscope à effet tunnel peut aussi être utilisé pour déplacer des atomes

Conclusion :

Si l'on ne pourra jamais espérer traverser les murs, ce phénomène purement quantique voit ses formidables propriétés de plus en plus utilisées, notamment dans le domaine des semi-conducteurs avec la diode à effet tunnel. D'autres phénomènes propres à la mécanique quantique mériteraient également d'être étudiés tel que la réflexion d'une particule par une marche de potentiel.

Regarder ce phénomène dans le Cohen-Tannoudji ou dans le Aslangul, pénétration de la particule dans la marche avant que celle-ci ne revienne en arrière.

Rajouter une comparaison entre l'action de la particule (impulsion x distance) et \hbar peut être intéressant.