Corrigé de la petite classe $n^o 3$
BARRIÈRE DE POTENTIEL ET EFFET TUNNEL

1. En physique classique, la particule venant de la gauche serait réfléchie sur la barrière, la région $0 < x < a$ étant interdite ($T = mv^2/2 = E - V \geq 0$).

2. On notera d'abord que, contrairement au cas traité dans la petite classe sur le puits de potentiel, l'énergie E est positive ici. L'équation aux valeurs propres de $\hat{H}$, qui donne les solutions stationnaires (soit $-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi'' + (V(x) - E)\Psi = 0$) s'écrit comme suit dans les différentes régions :

   - **Région de gauche où** $V = 0$: $\Psi'' + \frac{2mE}{\hbar^2}\Psi = 0$, soit :
   $$\Psi'' + k_1^2\Psi = 0 \quad \text{avec} \quad k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$
   dont la solution générale est une combinaison linéaire de e^{ik_1x} et de e^{-ik_1x}.

   - **Région centrale où** $V = V_1$: $\Psi'' - \frac{2m}{\hbar^2}(V_1 - E)\Psi = 0$, soit :
   $$\Psi'' - \alpha^2\Psi = 0 \quad \text{avec} \quad \alpha = \sqrt{\frac{2m(V_1 - E)}{\hbar^2}}$$
   dont la solution générale est une combinaison linéaire de $\operatorname{sh} \alpha x$ et $\operatorname{ch} \alpha x$.

   - **Région droite où** $V = V_2$: $\Psi'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_2)\Psi = 0$, soit :
   $$\Psi'' + k_2^2\Psi = 0 \quad \text{avec} \quad k_2 = \sqrt{\frac{2m(E - V_2)}{\hbar^2}}$$
   dont la solution générale est une combinaison linéaire de e^{ik_2x} et de e^{-ik_2x}.

   La solution proposée :
   $$\Psi(x) = e^{ik_1x} + \rho e^{-ik_1x} \quad \text{si } x < 0 \qquad \text{et} \qquad \Psi(x) = \tau e^{ik_2x} \quad \text{si } x > a$$
   n'est effectivement pas la plus générale puisque, dans la région de droite, seule l'onde e^{ik_2x} est retenue. Cela revient tout simplement à imposer la condition aux limites **que la source d'électrons est unique et se situe dans la région de gauche**. Dès lors, dans la région de droite, il ne peut y avoir de particules se dirigeant vers la gauche.

Les solutions stationnaires à énergie positive (spectre continu) ne sont effectivement pas normalisables ; elles sont donc en principe non physiques (comme les ondes planes) ; mais, de même qu'un paquet d'ondes libre peut s'obtenir par une superposition d'ondes planes, un paquet d'ondes en présence des potentiels définis plus haut peut s'obtenir par une superposition d'ondes stationnaires du type précédent (ou "ondes stationnaires de collision"). Plus simplement (et comme pour une onde plane ordinaire) on peut considérer l'onde stationnaire de collision comme décrivant un flux continu de particules initialement issues de la gauche et, selon le cas, réfléchies ou transmises. En fixant (conventionnellement) à l'unité le coefficient de l'onde incidente e^{ik_1x}, on peut interpréter les coefficients ρ et τ comme les coefficients de réflexion et de transmission **en amplitude**. C'est exactement le même problème que celui de la traversée d'un dioptre par une onde plane en électromagnétisme classique.

3. Les nombres d'onde k_1 et k_2 ont été calculés plus haut. Dans la région centrale (interdite en physique classique), la solution est de la forme $\lambda \operatorname{sh} \alpha x + \mu \operatorname{ch} \alpha x$. L'électron peut donc s'y trouver. De ce fait, la transmission à la région de droite est possible.

4. Comme dans le problème sur le puits de potentiel et pour la même raison, on doit imposer la continuité de Ψ et de sa dérivée première aux points de discontinuité du potentiel, $x = 0$ et $x = a$:

$$\text{En} \quad x = 0 \quad \begin{cases} 1 + \rho & = \quad \mu \\ ik_1(1 - \rho) & = \quad \alpha\lambda \end{cases}$$

$$\text{En} \quad x = a \quad \begin{cases} \lambda \operatorname{sh} \alpha a + \mu \operatorname{ch} \alpha a & = \quad \tau e^{ik_2 a} \\ \alpha(\lambda \operatorname{ch} \alpha a + \mu \operatorname{sh} \alpha a) & = \quad ik_2 \tau e^{ik_2 a} \end{cases}$$

On a donc 4 équations linéaires à 4 inconnues (ρ, τ, λ et μ) ; ici le système n'est pas homogène car on a fixé à l'unité le coefficient de l'onde plane pour donner aux coefficients ρ et τ leurs sens physiques. Du coup, la solution est unique. Du premier couple d'équations, on tire (en éliminant ρ qui n'est pas notre objectif) :

$$2 = \mu + \frac{\alpha\lambda}{ik_1}$$

Grâce au second couple, on exprime λ et μ en fonction de τ :

$$\begin{cases} \lambda & = \quad \tau e^{ik_2 a} \left(\frac{ik_2}{\alpha} \operatorname{ch} \alpha a - \operatorname{sh} \alpha a \right) \\ \mu & = \quad \tau e^{ik_2 a} \left(\operatorname{ch} \alpha a - \frac{ik_2}{\alpha} \operatorname{sh} \alpha a \right) \end{cases}$$

qu'on reporte dans l'équation $2 = \mu + \frac{\alpha\lambda}{ik_1}$, ce qui donne τ :

$$\tau = \frac{2\, e^{-ik_2 a}}{\left(1 + \frac{k_2}{k_1}\right) \operatorname{ch} \alpha a - i \left(\frac{k_2}{\alpha} - \frac{\alpha}{k_1}\right) \operatorname{sh} \alpha a}$$

Il reste à déterminer la probabilité de transmission T et la probabilité de réflexion $R = 1 - T$. Comment les exprimer en fonction des coefficients τ et ρ ? S'il paraît évident que T et R sont proportionnels à $\mid \tau \mid^2$ et $\mid \rho \mid^2$, il faut prendre quelque précautions. Utilisons l'interprétation d'un courant stationnaire d'électrons ; la quantité qui se conserve est alors la **densité de courant** : le nombre de particules incidentes sur la barrière par unité de surface et par unité de temps est égal à la somme du nombre de particules réfléchies par unité de surface et par unité de temps et du nombre de particules transmises par unité de surface et par unité de temps. Or $\mid \Psi \mid^2$ est, dans chaque région, proportionnelle à la **densité** de particules n (nombre de particules par unité de volume), alors que la densité de courant vaut $n\vec{v}$ où $\vec{v} = \hbar\vec{k}/m$ est la vitesse de la particule. On a donc les relations de proportionnalité suivantes :

- Onde incidente : $n_i \propto 1$ et $v_i = \hbar k_1/m$.
- Onde réfléchie : $n_r \propto \mid \rho \mid^2$ et $v_r = v_i = \hbar k_1/m$.
- Onde transmise : $n_t \propto \mid \tau \mid^2$ et $v_t = \hbar k_2/m$.

En conséquence :

$$R = \frac{n_r v_r}{n_i v_i} = \mid \rho \mid^2 \quad \text{mais} \quad T = \frac{n_t v_t}{n_i v_i} = \mid \tau \mid^2 \frac{k_2}{k_1}$$

d'où l'on tire :

$$T = \frac{4\, k_2/k_1}{\left(1 + \frac{k_2}{k_1}\right)^2 \operatorname{ch}^2 \alpha a + \left(\frac{k_2}{\alpha} - \frac{\alpha}{k_1}\right)^2 \operatorname{sh}^2 \alpha a}$$

En pratique, $\alpha a \gg 1$ et l'on peut écrire :

$$T \approx \frac{16\,(k_2/k_1)\exp(-2\alpha a)}{\left(1 + \frac{k_2}{k_1}\right)^2 + \left(\frac{k_2}{\alpha} - \frac{\alpha}{k_1}\right)^2}$$

On pourra vérifier en calculant ρ à partir du système d'équations linéaires précédentes que la somme $\mid \rho \mid^2 + \mid \tau \mid^2 \frac{k_2}{k_1}$ (soit $R + T$) vaut bien 1.

5. C'est la dépendance exponentielle du courant transmis par rapport à la largeur de l'interstice qui conduit à la sensibilité remarquable du microscope à effet tunnel aux détails topographiques de la surface. Toutefois, la hauteur de la barrière n'est pas toujours constante sur la surface ; elle dépend en effet du site en regard de la pointe (face à un atome ou entre deux atomes ; type d'atome s'il s'agit d'un alliage etc.). Le courant dépend en fait essentiellement du produit αa, le coefficient α étant relié à la hauteur de la barrière. Pour découpler les effets de α et de a, on fait osciller verticalement la pointe avec une faible amplitude en un point de coordonnées x et y fixées ; l'amplitude d'oscillation du courant sera proportionnelle à la dérivée de T par rapport à a, donc à la valeur de α au point considéré. En mesurant séparément $\alpha(x, y)$ et le produit αa, on obtient à la fois la topographie de la surface et certaines caractéristiques de la structure atomique en surface.