

MécaQ chap.3 – Effet tunnel – Exemples d'applications

1. Effet tunnel : transmission à travers une barrière de potentiel

- 1.1. Modélisation simplifiée
- 1.2. Rappel du comportement classique
- 1.3. Forme des solutions et conditions à la limite
- 1.4. Coefficient de transmission à travers la barrière : effet tunnel
- 1.5. (Culturel) Allure de la densité de probabilité de présence

2. Quelques exemples impliquant l'effet tunnel

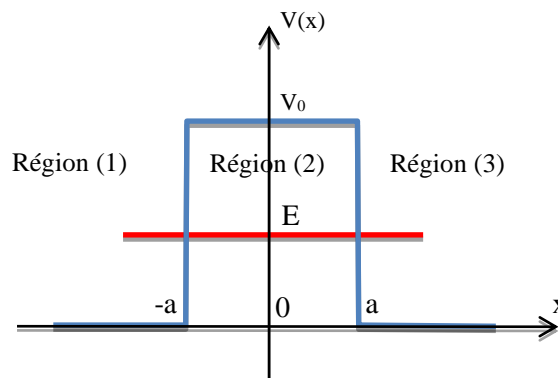
- 2.1. Microscopie à effet tunnel
- 2.2. Explication de la radioactivité alpha
- 2.3. Inversion de la molécule d'ammoniac
- 2.4. Lien avec la chimie : liaison covalente

Intro : Au chapitre précédent, on a vu que les fonctions d'onde peuvent pénétrer un peu sous les barrières de potentiel, du fait de l'existence d'ondes évanescentes. On montre ici que ce phénomène peut donner lieu à **un effet tunnel** : une particule peut traverser une barrière, classiquement infranchissable, mais quantiquement franchissable, comme si la particule avait creusé un tunnel pour passer. On présente quelques applications : microscopie à effet tunnel, radioactivité alpha, inversion de la molécule d'ammoniac.

1. Effet tunnel : transmission à travers une barrière de potentiel

1.1. Modélisation simplifiée

On considère une particule libre d'énergie $E > 0$ provenant des $x < 0$, et arrivant sur une barrière de potentiel modélisée de manière rectangulaire, de hauteur V_0 telle que $E < V_0$.



1.2. Rappel du comportement classique

Pour une particule classique, d'énergie totale $E = E_c + V(x)$, on doit toujours vérifier $E_c > 0 \Leftrightarrow E > V(x)$

Pour une particule **classique** $E < V_0$, la barrière est **infranchissable**

1.3. Forme des solutions et conditions à la limite

On recherche les états stationnaires. Cette situation a déjà été étudiée au chapitre précédent, dans le cas du puits de hauteur finie :

$$\begin{aligned}\varphi_1(x) &= A_1 \cdot e^{ik_1x} + B_1 \cdot e^{-ik_1x} \\ \varphi_2(x) &= A_2 \cdot e^{k_2x} + B_2 \cdot e^{-k_2x} \\ \varphi_3(x) &= A_3 \cdot e^{ik_1x} + B_3 e^{-ik_1x}\end{aligned}$$

$$\text{avec } k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \text{ et } k_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}.$$

Par analogie avec la physique des ondes, on anticipe l'existence d'une onde réfléchie dans la région (1), nécessaire pour que les conditions aux limites en $x = -a$ puissent être vérifiées. Par contre, dans la région (3), puisque aucune source de particules n'existe en $+\infty$, il n'y a aucune raison qu'une OPPH se propage dans le sens des x décroissants. Ainsi $B_3 = 0$.

On rappelle que, dans la région (2), si la barrière était infiniment large, l'onde serait évanescence et pénétrerait sur une distance caractéristique $\delta = \frac{1}{k_2}$.

Le fait que la barrière soit de largeur finie a deux conséquences :

- il y a une probabilité non nulle pour que l'onde ressorte dans la région (3), c'est la raison pour laquelle on ne peut affirmer que A_3 est nul
- dans la région (2), la fonction d'onde est une somme d'ondes évanescences, la seconde pouvant être vue comme la réflexion de la première sur le 2nd bord de la barrière de potentiel

Effet tunnel dû à l'existence d'ondes évanescences sous la barrière

C'est l'existence d'ondes évanescences sous la barrière de potentiel qui implique l'existence, pour la particule, d'une probabilité non nulle de traverser la barrière de potentiel, comme si la particule y avait creusé un tunnel.

L'application des conditions à limite donne 4 équations indépendantes, pour 5 constantes d'intégration à déterminer. Il est donc toujours possible de fixer l'une d'elle (l'amplitude de l'onde incidente par exemple) et d'en déduire les quatre autres, sans conditions restrictives sur k_1 et k_2 . *Il n'y a donc pas quantification de la longueur d'onde et de l'énergie*, contrairement au cas du puit fini. Ce n'est pas surprenant, puisque la particule *n'est pas confinée*.

NB : Le calcul des coefficients B_1 , A_2 , B_2 et A_3 est pénible et n'est pas au programme (peut être sûrement trouvé sur le web en qq clics).

1.4. Coefficient de transmission à travers la barrière : effet tunnel

- ❖ Donner la définition mathématique des trois courants de probabilité suivants :
 - onde incidente
 - onde réfléchie dans milieu (1)
 - onde transmise dans milieu (3)

On définit les probabilités de transmission T et de réflexion R par le rapport des normes des courants de probabilités associés (on travaille encore avec des solutions sous forme d'états stationnaires).

- ❖ En déduire l'expression de R et T en fonction de B_1 , A_3 et A_1
- ❖ Quelle relation R et T doivent-ils vérifier (aucun calcul) ?

Les calculs sont hors programme et donnent (ne pas retenir) :

$$T = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \operatorname{sh}^2 \left(\frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} a \right)}$$

Pour discuter confortablement de cette expression, on fait l'hypothèse d'une « barrière épaisse », i.e. :

$$\exp\left(\frac{2a}{\delta}\right) \gg 1$$

car alors (calcul facile) :

$$T \approx \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} \exp\left(-\frac{2a}{\delta}\right)$$

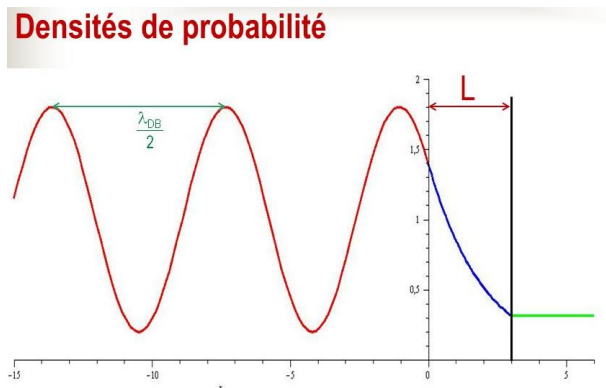
$$\delta = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$$

❖ Discuter physiquement de l'influence de m et $(E - V_0)$ sur la probabilité de transmission de la particule à travers la barrière

Quelques ordres de grandeur :

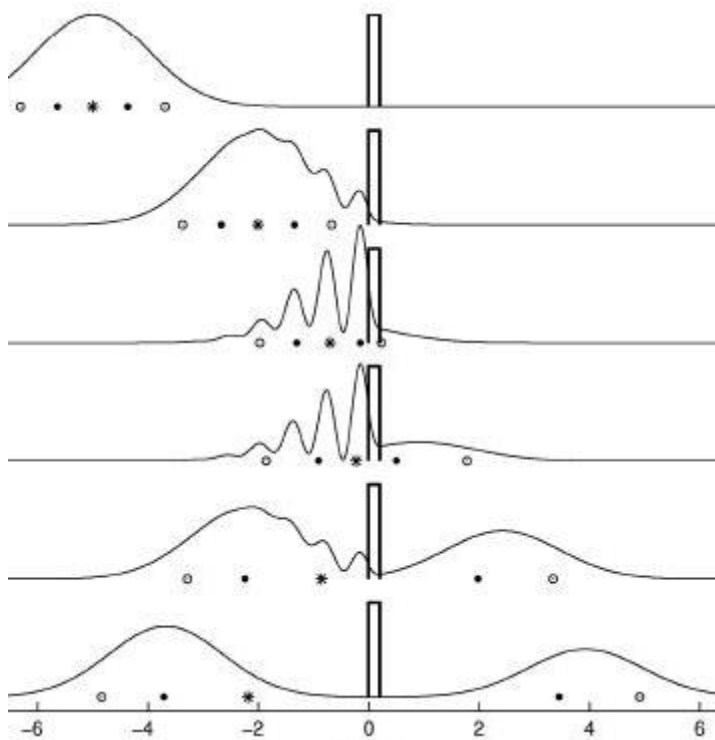
- électron d'énergie $E = 1 \text{ eV}$ rencontrant une barrière de potentiel $V_0 = 2 \text{ eV}$ et d'épaisseur $a = 0,1 \text{ nm}$: on calcule $\delta = 0,2 \text{ nm}$ et $T \approx 0,78$: l'électron a une probabilité importante de franchir la barrière.
- proton d'énergie $E = 1 \text{ eV}$ rencontrant une barrière de potentiel $V_0 = 2 \text{ eV}$ et d'épaisseur $a = 0,1 \text{ nm}$: on calcule $\delta = 4,6 \text{ pm}$ et $T \approx 4 \cdot 10^{-19}$: le proton n'a quasiment aucune chance de franchir la barrière.
- électron d'énergie $E = 1 \text{ eV}$ rencontrant une barrière de potentiel $V_0 = 2 \text{ eV}$ et d'épaisseur $a = 1 \text{ nm}$: on calcule $\delta = 0,2 \text{ nm}$ et $T \approx 2 \cdot 10^{-4}$: l'électron a une probabilité faible de franchir la barrière.

1.5. (Culturel) Allure de la densité de probabilité de présence



A gauche est représentée la densité de probabilité dans le cas d'un état stationnaire (OPPH) incident. Dans la zone (1), les ondes incidente et réfléchie interfèrent et les maxima sont séparés d'une demi longueur d'onde de de Broglie (calculée pour l'onde incidente).

A droite est représentée la densité de probabilité dans le cas d'un paquet d'onde modélisant de manière plus réaliste une particule incidente sur une barrière peu épaisse. On voit les interférences entre incidente et réfléchie lors de leur croisement.



2. Quelques exemples impliquant l'effet tunnel

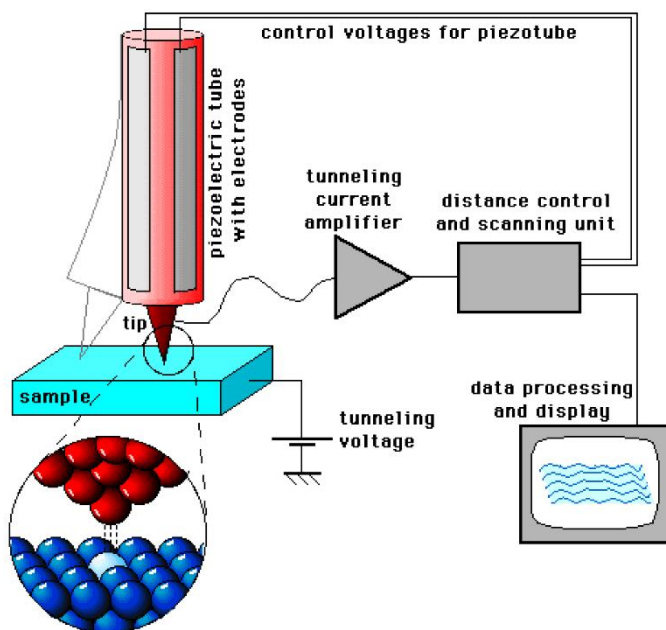
2.1. Microscopie à effet tunnel

La grande sensibilité de T à la largeur a de la barrière de potentiel peut être mise à profit pour tracer la topographie d'une surface : c'est la microscopie à effet tunnel. La résolution est suffisamment bonne pour voir les structures atomiques.

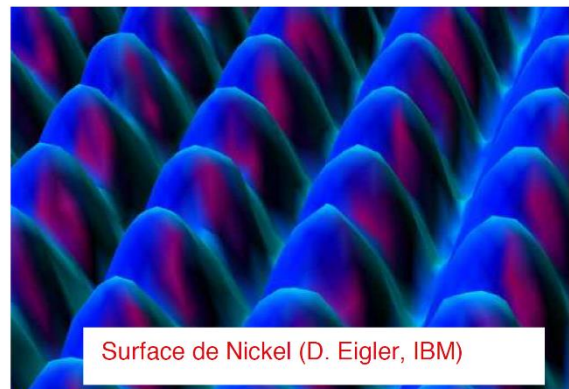
L'idée est simple : on cherche à imager une surface conductrice à l'aide d'une pointe également conductrice. Cette sonde, constitutive du microscope, doit être usinée de manière à former une pointe extrêmement fine, jusqu'à atteindre une largeur de seulement quelques atomes. Cette pointe doit être contrôlable en position à l'ångström près pour atteindre la résolution atomique. Cela est rendu possible par l'utilisation d'actionneurs piézoélectriques. On voit là toute la difficulté technologique à réaliser ce type d'appareil.

On applique une tension entre l'échantillon et la pointe, et cette dernière est approchée de l'échantillon, sans le toucher. Sous l'effet de la tension, les porteurs libres tendent à traverser de la pointe vers l'échantillon. Le vide entre les deux constitue une barrière de potentiel à franchir, et c'est ici qu'intervient l'effet tunnel : un « courant tunnel » apparaît lorsque la pointe est suffisamment proche de l'échantillon. Comme vu précédemment, ce courant dépend fortement de la distance pointe-échantillon.

On asservit le circuit en courant : la pointe est actionnée verticalement de manière à maintenir constant le courant tunnel. L'évolution de sa position verticale est enregistrée, et tracée en fonction de sa position horizontale elle fournit une image du relief de l'échantillon.



Binnig et Rohrer (IBM) 1981-85
Prix Nobel 1986



Surface de Nickel (D. Eigler, IBM)

Pour un électron tel que $V_0 - E = 1$ eV, on a :

largeur du puits de potentiel	coefficient de transmission tunnel
$L = 5$ Angströms	$T \approx 6 \cdot 10^{-3}$
$L = 6$ Angströms	$T \approx 2 \cdot 10^{-3}$

Le courant varie extrêmement vite avec la distance !

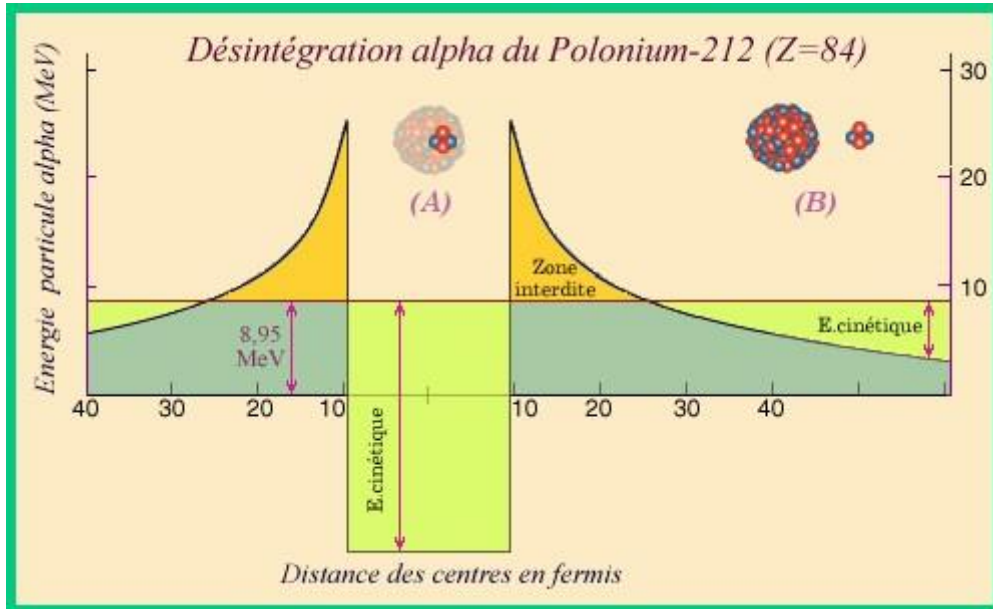
Une simulation de l'effet tunnel : <https://phet.colorado.edu/fr/simulation/quantum-tunneling>

2.2. Explication de la radioactivité alpha

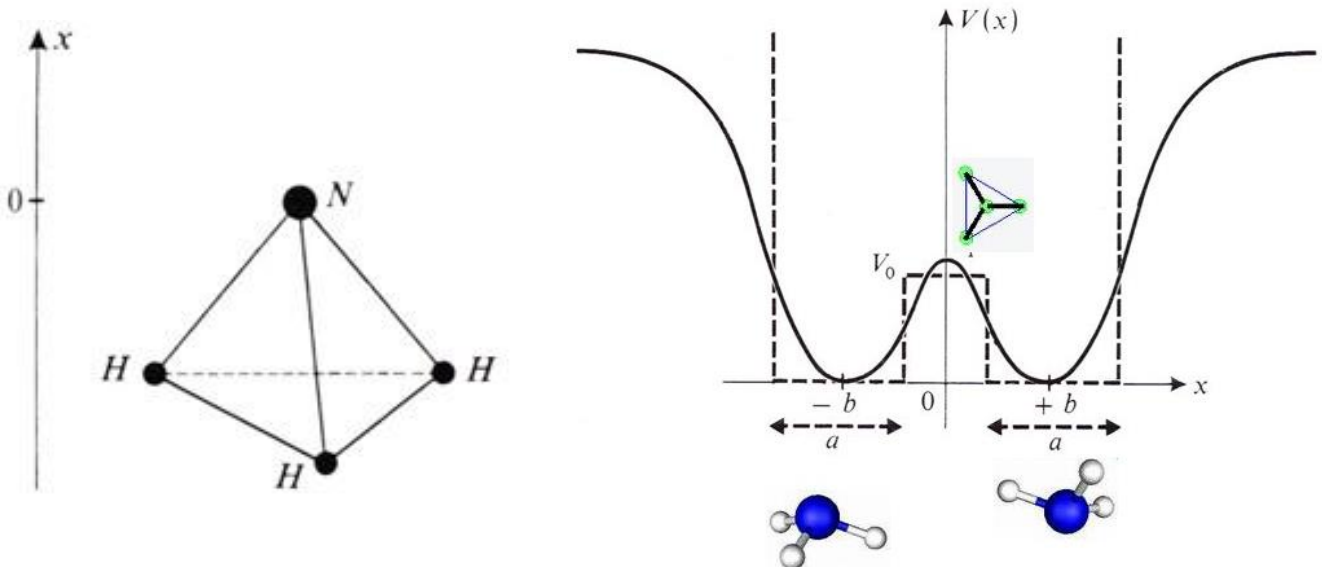
L'effet tunnel est impliqué également dans l'explication de l'existence de la radioactivité alpha : certains noyaux se désintègrent spontanément en émettant une particule alpha, i.e. un noyau d'Hélium.

Exemple de la désintégration du Polonium : ${}^{210}_{84}\text{Po} \rightarrow {}^{206}_{82}\text{Pb} + {}^4_2\text{He}$

Pour expliquer cette désintégration, on imagine que la particule alpha est initialement piégée dans le puit de potentiel créé par le reste du noyau de Polonium. La barrière formant le puit est suffisamment étroite pour que la particule alpha puisse sortir par effet tunnel.



2.3. Inversion de la molécule d'ammoniac



La molécule d'ammoniac est classiquement représentée sous une forme pyramidale (méthode VSEPR). En réalité, l'atome d'azote a une probabilité significative de traverser le plan constitué des trois atomes d'hydrogène, à la manière d'un parapluie qui se retournerait du fait d'un vent violent. On parle de **l'inversion de la molécule d'ammoniac**.

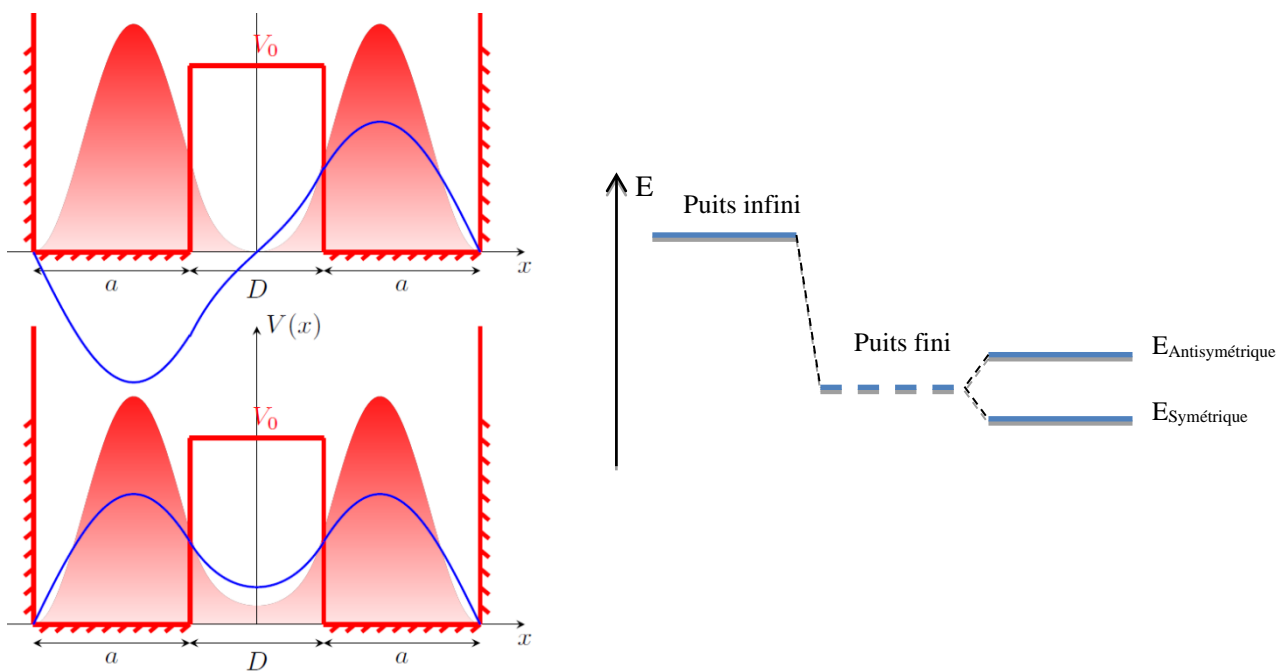
Le dessin de gauche permet de définir la « coordonnée d'inversion ». A droite est représenté le diagramme d'énergie potentiel de la molécule en fonction de cette coordonnée. On remarque deux positions préférentielles en $x = \pm b$. Ce sont les deux situations dessinées sous le graphe. La position $x = 0$ correspond au cas où tous les atomes sont dans le même plan, c'est la situation la moins favorable énergétiquement bien-sûr. La situation est symétrique par rapport à $x = 0$, car rien ne permet de privilégier un des côtés du plan formé par les atomes H. On parle de **double puits symétrique**.

En pointillé est représentée la modélisation simplifiée de ce double puit, sous forme rectangulaire, les bords étant de potentiel infini, le potentiel « séparateur » V_0 étant fini.

Remarque : En « pensant quantique », on se doute qu'en réalité, à un instant t , la molécule d'ammoniac se trouve « dans tous les états possibles à la fois », donc dans une superposition de géométries possibles.

Ci-dessous à gauche sont représentés deux états stationnaires (l'un symétrique, l'autre antisymétrique), solutions de l'équation de Schrödinger dans le cas du double puit séparé par une barrière de potentiel de hauteur finie V_0 . En trait bleu, les fonctions d'onde, en rouge les densités de probabilités. On voit que la probabilité de présence sous la barrière n'est pas nulle.

Ci-dessous à droite sont représentés les niveaux d'énergie des deux premiers états stationnaires fondamentaux : E_{sym} et $E_{antisym}$. Ils sont comparés à l'énergie de l'état fondamental des cas « puits fini simple » et « puits infini simple ». Le puits fini simple de hauteur V_0 est d'énergie plus basse que le puits infini simple, on l'a déjà vu. L'état symétrique est moins confiné que l'état antisymétrique, son niveau d'énergie est donc le plus bas des deux.



2.4. Lien avec la chimie : liaison covalente

Le diagramme énergétique représentant la levée de dégénérescence des états symétrique et antisymétrique de l'état fondamental de la molécule d'ammoniac n'est pas sans rappeler les **diagrammes d'orbitales moléculaires**, vus en chimie. C'est normal, car la formation de la liaison covalente peut être comprise de manière similaire. Lorsque deux atomes se rapprochent, leurs électrons sont initialement stables autour de leur atome. Ils ne peuvent sauter d'un atome à l'autre : il y a une barrière de potentiel. Plus les atomes s'approchent, plus la barrière devient étroite, et l'effet tunnel devient alors possible : des électrons d'un atome peuvent se stabiliser autour de l'autre atome. A l'équilibre, une fois la molécule formée, l'état symétrique (i.e. l'état liant, de plus basse énergie) correspond à une localisation des électrons entre les deux noyaux d'atomes. Dans cet état, les électrons sont moins confinés, donc l'état d'énergie est plus faible que dans le cas de deux atomes non liés : la molécule est l'état le plus stable... c'est pourquoi elle se forme.

6.5.4. Effet tunnel

Effet tunnel.

Coefficient de transmission associé à une particule libre incidente sur une barrière de potentiel.

Citer quelques applications de l'effet tunnel.
Définir le coefficient de transmission comme un rapport de courants de probabilités.
Utiliser une expression fournie du coefficient de transmission à travers une barrière de potentiel.