# LP41 - Effet tunnel

Cléments (DE LA SALLE + COLLÉAUX)

### 15juin2020

# Niveau : L2

# Bibliographie

🔺 J'intègre MP, Salamito & Sanz	$\rightarrow$	Évidemment il carry
🖾 J'intègre PC, Sanz	$\rightarrow$	Plus de choses
\land Mécanique quantique, Basdevant &	$\rightarrow$	
Dalibard		
⊿ Aslangul 1	$\rightarrow$	
⊿ <i>BUP 699</i>	$\rightarrow$	
≰ı poly sympa de MP, J.R. Seigne	$\rightarrow$	
▲ Physique Nucléaire, Blanc	$\rightarrow$	
\land Physique quantique : fondements, Le	$\rightarrow$	Lourd
Bellac		
⊿ Cohen	$\rightarrow$	Un bon ami

# Prérequis

# Expériences

۲

- $\succ$ Courants de densité de probabilité
- $\succ$  Ondes évanescentes
- $\succ$ Radioactivité
- $\succ\,$  Confinement d'une particule quantique

≻ Équation de SCHRÖDINGER stationnaire

# Table des matières

Τa	Table des matières						
1	Microscopie à effet tunnel   1.1 Contexte et modélisation   1.2 Franchissement d'une barrière par effet tunnel	<b>2</b> 2 4					
2	Effet tunnel dans la matière   2.1 Liaisons covalentes   2.2 Radioactivité α	<b>7</b> 8 9					

## Introduction

Découvert en 1928 par GAMOV qui l'utilise pour modéliser la désintégration  $\alpha$ ... Source à vérifier.

On peut aussi imaginer un plan plus classique en mode

- 1. Effet tunnel : purement théorique et chaque sous-partie détaille bien l'importance des conditions aux limites / courants de probabilité...
- 2. Application : Avec applications technologiques (microscope) et naturelles (liaisons covalentes + radioactivité  $\alpha$ )

### 1 Microscopie à effet tunnel

### 1.1 Contexte et modélisation

- ▲ Sanz p.864
- ▲ Poly de JRS
- 🛋 BUP 699

La microscopie optique est limitée très vite par la diffraction. Il existe pleeeeeeeiiiiin de manières de repousser cette limite  $\not = LP32 + Tout \ est \ quantique$ . Mais celle qui nous intéresse c'est le microscope à effet tunnel parce que dans "microscope à effet tunnel", il y a "microscope"... Paraît que le BUP fait une bonne intro. Nobel 1986.

Les électrons sont présents dans le métal et on cherche à les arracher à l'aide d'un champ électrique suffisamment intense.



FIGURE 1.1 – Présentation du problème : on applique une différence de potentiel entre le métal à étudier et une pointe que l'on approche de ce substrat.

Les électrons sont stables dans le métal, et en sortir leur demande de l'énergie. Cependant en approchant la pointe, on leur donne la possibilité d'y migrer. NOtons au passage que la pointe c'est vraiment une pointe... Genre taillée à l'atome près !



FIGURE 1.2 – C'est marrant parce qu'il a fallu un microscope pour faire cette image...



FIGURE 1.3 – Modélisation du paysage énergétique à la surface du métal avec et sans la pointe.

Il faut faire l'analogie avec la mécanique classique : une lance une balle sur une colline. Si elle a assez d'énergie cinétique, elle passe le maximum de la colline et la franchit. Sinon elle redescent et revient en arrière. Classiquement il est donc impossible pour les électrons de franchir la barrière qui est plus haute en énergie que le niveau de Fermi du métal (ne pas parler de niveau de FERMI!).

Pourtant on observe bien l'apparition d'un courant, c'est donc que les électrons arrivent à franchir cette barrière! Cette possibilité est entièrement due à la nature ondulatoire des électrons. C'est n'est **pas un phénomène quantique mais ondulatoire**. Seulement la quantique permet de l'appliquer à la matière, puisque celle-ci y est décrit comme une onde.

#### Définition : Effet tunnel

Phénomène durant lequel une onde franchit une barrière de potentiel qu'elle n'aurait pas pu classiquement passer.

#### Effet tunnel optique

Ça existe aussi en optique, dioptre, réflexion totale tout ça tout ça... Ne pas espérer le faire en live, c'est ultra chaud. Ou alors faut utiliser des ondes centimétriques mais du coup c'est beaucoup moins visuel.

Revenons au cas de notre microscope et modélisons la barrière de la façon la plus simple possible : un potentiel constant par morceau (afin que le calcul de la fonction d'onde stationnaire y soit suffisamment simple).



FIGURE 1.4 – Modélisation simplifiée de la barrière de potentiel.

Cette modélisation simplifiée nous permet de nous écarter un peu du problème concret du microscope afin de mener des cacluls généralisables dans toute situation semblable. Écrire l'expression mathématique

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{ si } |x| > a/2 \\ V_0 & \text{ si } |x| < a/2 \end{cases}$$

### 1.2 Franchissement d'une barrière par effet tunnel

#### \land Sanz p.858

▲ Basdevant p.71

On peut couper en deux si jamais c'est trop long. Faire genre "résolution de SCHRÖDINGER" puis "coefficient de transmission / réflexion".

On résoud l'équation de SCHRÖDINGER stationnaire avec  $E < V_0$  parce que ce qui nous intéresse c'est de voir justement que malgré le manque d'énergie, on peut passer! On rappelle vite fait que pour une particule classique, il est impossible de franchir une telle barrière.

Donner les solutions dans chacune des zones de la même forme que dans le Sanz.

avec ch et sh par symétrie

avec les exponentielles pour faire le lien avec les ondes incidente, réflechie et transmise. Ceci permet de justifier que l'on retire le terme en  $B_I II$ 

$$\varphi_{I}(x) = \underbrace{A_{I}e^{ikx}}_{\text{incidente}} + \underbrace{B_{I}e^{-ikx}}_{\text{réflechie}}$$
$$\varphi_{II}(x) = A_{II}\operatorname{ch} qx + B_{II}\operatorname{sh} qx$$
$$\varphi_{III}(x) = \underbrace{A_{III}e^{ikx}}_{\text{transmise}} + \underbrace{B_{HT}e^{-ikx}}_{\text{ça dégage}}$$

On peut parler d'ondes évanescentes dans la barrière pour faire le lien avec l'EM.

On écrit proprement les relations de continuité de  $\varphi$  et  $\varphi'$ .

Puis on veut définir des coefficients de réflexion et transmission. Pour ça on utilise les courant de probabilité.

$$J_i = \frac{\hbar k}{m} |A_I|^2 \qquad J_r = -\frac{\hbar k}{m} |A_I|^2 \qquad J_t = \frac{\hbar k}{m} |A_{III}|^2$$

On peut vérifier que l'on a  $J_i + J_r = J_t$  ou encre  $J_i = |J_r| + J_t$ , donc on obtient les probabilités de réflexion et de transmission :

$$R = \frac{|J_r|}{|J_i|} = \frac{|B_I|^2}{|A_I|^2} \qquad T = \frac{|J_t|}{|J_i|} = \frac{|A_{III}|^2}{|A_I|^2}$$

Après calculs non faits ici (je pense) on obtient alors les expressions dégueux :

$$R = \frac{\frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \operatorname{sh}^2(qa)}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \operatorname{sh}^2(qa)}$$
$$T = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \operatorname{sh}^2(qa)}$$

FIGURE 1.5 – Expressions de R et T avant simlpification.

#### Remarques

-T > 0 il y a toujours une petite chance que la particule passe la barrière

--R+T=1 puisque ce sont des probabilités d'évènements complémentaires

On est amenés à poser une distance de pénétration

$$\delta = \frac{1}{q} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$$

Puis à faire une approximation pour simplifier... L'approximation de la barrière épaisse :  $a \gg \delta$  de sorte que

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

Particule	<i>m</i> (kg)	$V_0$ (eV)	a (nm)	$\delta$ (nm)	Т
Électron	$10^{-30}$	4	0,3	0, 1	$10^{-2}$
Électron	$10^{-30}$	40	0,3	$4 \times 10^{-2}$	$10^{-6}$
Électron	$10^{-30}$	4	3	0,1	$10^{-20}$
Proton	$10^{-27}$	4	0,3	$4 \times 10^{-3}$	$10^{-63}$
Proton	$10^{-27}$	4	3	$2 \times 10^{-3}$	$10^{-628}$

FIGURE 1.6 – Quelques OG pour bien voir l'influence de paramètres.

Bien montrer schématiquement la forme des ondes :



FIGURE 1.7 – Forme des ondes.

#### Influence des paramètres

Bien montrer l'infuence des paramètres en particulier la masse (limite classique qui est la même que lorsque  $\hbar = 0$ ). On voit dans le tableau que déjà un proton qui veut sortir de l'atome il n'y arrivera pas  $T = 10^{-63}$ .

#### Interprétation qualitative

#### ▲ Sanz p.863

On peut comprendre ce phénomène qualitativement à partir de la relation d'HEISENBERG temps-énergie :

$$\Delta E \Delta \tau \sim \hbar$$

On imagine que la particule à une énergie qui fluctue de  $\Delta E$ , ce qui lui permet de passer au dessus de la barrière pendant un certain temps  $\Delta \tau$ . Plus  $\Delta E$  est grand, plus  $\Delta \tau$  est faible... Ce qui explique que la particule pourra passer de fines et hautes barrières ou bien des longues mais basses barrières.

#### Retour sur le microscope

- Barrière pas trop haute : on approche la pointe à moins de 1 nm
- Tension : mV V
- Courant : pA nA
- Le courant sera en

$$I = I_0 \exp\left(-\frac{2d}{\delta}\right)$$

— Deux modes d'utilisation as Vidéo:

**Topographie** Maintenir I constante donc d constant et mesurer précisément d à l'aide de piézos en éliminant les vibrations

**Spectroscpie** Fixer la position de la pointe et faire varier d afin d'extraire des propriétés physiques du substrat (genre le travail d'extraction)

- Précision :  $\frac{\Delta I}{I} = -2\frac{2\Delta d}{\delta}$  donc avec  $\delta \sim 1$  nm et une précision de 2% on a  $\Delta d = 10^{-11}$  m !



FIGURE 1.8 – Une image spectaculaire réalisée avec le microscope à effet tunnel.

# 2 Effet tunnel dans la matière

### 2.1 Liaisons covalentes

▲ Cohen p.412 + Basdevant p.97 Juste pour justifier la modélisation

▲ Basdevant p.93 + Le Bellac p.169 + Sanz PC p.1264 Pour la résolution.

Prenons l'exemple le plus simple : la molécule de  $H_2^+$  constituée de deux noyaux et un électron. L'électron peut être soit attaché au premier noyau, soit au deuxième. Mais il peut également passer d'un noyau à l'autre par effet tunnel. On modélise donc ça comme un double puits.



FIGURE 2.1 – Notations utilisées pour le double puits.

Bien montrer que les deux atomes infiniment éloignés correspondent à deux puits infinis.

Blabla faire plus ou moins de calculs, limite on peut avoir déjà fait la résolution dans le cas de la molécule d'ammoniac (pré-requis) pour aller directement à l'essentiel : l'abaissement du niveau d'énergie et la dégénérescence en deux niveaux d'énergie.



FIGURE 2.2 – Abaissement global et dégénéresence des niveaux d'énergie.

$$E'_{0} \sim \underbrace{\frac{\hbar^{2}\pi^{2}}{2ma^{2}}}_{E_{0}} \left(1 - \frac{2}{Ka}\right)$$
$$A \sim E_{0} \frac{4e^{-K\Delta}}{Ka}$$
$$K = \frac{\sqrt{2m(V_{0} - E)}}{\hbar}$$

Pour la forme de  $E_0$ , voir  $\checkmark LP40$  c'est juste un puits de potentiel infini.

On justifie l'abaissement  $E_0 \to E'_0$  par le fait que, vu que l'électron peut "déborder" dans la zone intermédiaire, il est moins confiné donc plus stabilisé  $\not = LP40 + Basdevant p.96$ .

C'est donc l'effet tunnel qui est responsable de la stabilisation de la molécule : **stabilisation par déconfinement** 

Mais l'effet tunnel est aussi le responsable de la dégénérescence qui va stabiliser d'autant plus la molécule : l'électron se trouvera dans l'état symétrique (plus faible en énergie) de préférence s'il n'est pas trop excité.

#### $\underline{OdG}$

En vrai cette dégénérescence n'a pas vraiment d'effet sur la stabilisation puisque  $2A \sim 10^{-4} \text{ eV}$ . Tandis que l'on a typiquement  $Ka \sim \pi \not = Basdevant p.98$  et  $E_0 \sim 1 \text{ eV}$  $factor LP40 \text{ donc } E_0 - E'_0 \sim 0.5 \text{ eV}.$ 

On remarque que  $\Delta$  ne joue pas dans le shift  $E_0 - E'_0$ . Par contre  $V_0$  oui (à travers K). La distance entre les atomes change à la fois  $\Delta$  et  $V_0$ , donc plus les atomes sont proches, plus la molécule est stabilisée.

Expliquer que la liaison covalente consiste alors en la mise en commun d'un électron.

#### **2.2** Radioactivité $\alpha$

▲ Poly de JRS ▲ Sanz MP p.868 ▲ Sanz PC p.1260 ▲ Basdevant, Énergie Nucléaire, p.87

#### Rappels sur la radioactivité $\alpha$

La radiocactivité  $\alpha$  correspond à l'émission, par un noyau instable, d'une particule  $\alpha$ , qui est en réalité un noyau d'hélium <sup>4</sup>/<sub>2</sub>He. Le noyau d'hélium, qui contient 2 protons et 2 neutrons, est un noyau particulièrement stable. La radioactivité  $\alpha$  permet aux noyaux lourds, contenant un nombre important de protons, de diminuer la répulsion électrostatique des protons par émission d'une particule  $\alpha$ , qui emporte deux protons. Par exemple, le noyau bien connu de tous  $^{236}_{22}$ U donne lieu à ce mode de désintégration :

 $^{236}_{92}{\rm U} \rightarrow ^{232}_{90}{\rm Th} + ^{4}_{2}{\rm He}$ 

Mais l'uranium 236 n'est pas le seul noyau à subir cette radioactivité : c'est le cas de nombreux autres noyaux dont on peut recenser les caractéristiques dans un tableau.

Élément	Énergie $E$ des $\alpha$ en MeV	Demi-vie
<sup>212</sup> <sub>84</sub> Po	8,95	$3,0\times 10^{-7}\mathrm{s}$
$^{240}_{96}$ Cm	6,40	27 jours
<sup>226</sup> Ra	4,90	1600 ans
<sup>232</sup> <sub>90</sub> Th	4,05	$1,4\times 10^{10}$ ans
<sup>230</sup> <sub>92</sub> U	5,60	21 jours
$^{232}_{92}$ U	$5,\!21$	73  ans
$^{234}_{92}$ U	4,70	$2,4\times 10^5$ ans
<sup>236</sup> <sub>92</sub> U	4,45	$2,3\times 10^7~{\rm ans}$
<sup>238</sup> <sub>92</sub> U	4,19	$4,4\times 10^9$ ans

FIGURE 2.3 – Caractérisitiques de radioactivités  $\alpha$  - E est l'énergie cinétique de la particule  $\alpha$  émise

Quelques remarques :

- 24 OdG de différence entre les temps de demi-vie des thorium 232 et uranium 238
- le temps de demi-vie a l'air décroissant avec l'énergie cinétique E de la particule  $\alpha$  émise
- Dès 1911, Geiger et Nuttal avaient établi la loi empirique :

$$\ln \tau_{1/2} = A + \frac{B}{\sqrt{E}}$$

avec A et B constantes ne dépendant que du noyau père étudié.



FIGURE 2.4 – Tiré du \land Blanc, p.109

Mais ça reste empirique, il faut trouver un modèle pour expliquer ça!

Georges GAMOV arrive en 1928 avec un modèle théorique utilisant...l'effet tunnel (l'histoire a oublié les physiciens Gurney et Condon qui l'ont découvert en même temps et chacun de leur côté)!

Ce modèle considère que la particule  $\alpha$  qui sera émise est déjà dans le noyau mais confinée (eh comme nous!) dans un un puits de potentiel (al pas comme nous là..).



FIGURE 2.5 – Potentiel de la radioactivité  $\alpha$  - Discussion précise sur la forme du potentiel avec OdG dans \land Sanz, p.870

Pour qu'il y ait effectivement radioactivité, il faut que la particule  $\alpha$  parvienne à sortir du noyau par effet tunnel. Il s'agit bien d'un effet tunnel car on a typiquement  $V_0 = 40$  MeV et  $V_m = 30$  MeV alors que l'énergie E de la particule  $\alpha$  est inférieure à 10 MeV.

Pour calculer la demi-vie radioactive, on a besoin de la probabilité de transmission T(E) de la particule  $\alpha$  par effet tunnel.

En considérant que la particule se libère à un rayon  $R_e$ , la probabilité T(E) s'écrit

$$T(E) \simeq \exp\left[-2\int_{R}^{R_e} \frac{\sqrt{2m_{\alpha}(V(r)-E)}}{\hbar} \mathrm{d}r\right]$$

qui n'est rien d'autre que l'intégration de la formule trouvée auparavant pour T(E). Traiter le problème comme une simple barrière de potentiel de largeur  $R_e - R$  ne donne pas des résultats satisfaisants.

en rappelant que le potentiel V(r) est coulombien en dehors de la particule,  $V(r) = \frac{2(Z-2)e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$ , l'intégration donne

$$\ln T(E) \simeq -\frac{\pi R V_m}{\hbar} + 2R \frac{\sqrt{V_m m_\alpha}}{\hbar}$$

avec  $V_m = \frac{2(Z-2)e^2}{4\pi\epsilon_0 R}$ Compte tenu de son énergie cinétique, la particule  $\alpha$  fait des aller-retours dans le noyau et ne cesse de « rebondir » contre la barrière de potentiel. À chaque « collision » sur la barrière de potentiel, la particule  $\alpha$ a une probabilité T d'être transmise au-delà du noyau. Autrement dit, il lui faut en moyenne 1/T collisions pour sortir du noyau. Si l'on note  $\tau_0$  la durée de traversée du noyau, le temps moyen que la particule  $\alpha$  passe dans le noyau vaut  $\tau = \tau_0/T$ . Un modèle statistique permet ensuite de montrer que la demi-vie  $t_{1/2}$  se déduit simplement de  $t : t_{1/2} = \tau \ln 2$ .

En écrivant alors  $\ln T(E) = -\ln \frac{1}{T} = -\ln \frac{\tau_{1/2}}{\tau_0 \ln 2}$  on voit que ça marche bien, on retombe sur la loi de Geiger et Nuttal!

## Questions

Développement effet tunnel : Justification physique pour les conditions limites ? Fonction d'onde : probabilité de présence qui ne peut pas être discontinue Dérivée : continuité du courant de probabilité sinon source de particules quelque part

Connaissez-vous des manifestations macroscopiques de phénomènes quantiques? Supraconductivité

Sur le calcul de la probabilité de transmission : comment convaincre un élève que la probabilité de transmission est le rapport des coefficients des deux ondes planes ? Analogie avec la physique des ondes, il faudrait raisonner en terme de courant de probabilité

Pourquoi chercher des solutions de l'équation de Schrödinger stationnaire?

Comment peut-on interpréter l'effet tunnel avec les relations d'incertitude de Heisenberg tempsénergie ?

Sur le microscope à effet tunnel : comment se fait le déplacement de la pointe du microscope à effet tunnel ? À courant constant ou à hauteur constante

Comment faire si on n'a pas une surface conductrice?

Sur la molécule d'ammoniac : comment répondre physiquement à la question d'un élève qui ne comprendrait pas pourquoi on a une fonction d'onde antisymétrique bien que le potentiel soit lui symétrique?

Discussion caractère ondulatoire ou quantique : tu as pris un exemple d'électromagnétisme mais les photons sont des objets quantiques, est-ce que tu as un exemple plus convaincant pour montrer que les ondes évanescentes sont issues de la théorie ondulatoire ? Les ondes sonores peuvent traverser des murs, il n'est pas possible d'insonoriser parfaitement une pièce. Radioactivité alpha : justification de l'expression du coefficient de transmission ? Barrière quelconque = somme de barrières rectangulaires infinitésimales et on intègre. Remarque, on a alors plus dans l'approximation de la barrière épaisse ! Il y a des justifications, peut-être d'autres calculs, peut-être des simulations... (réflexion ouverte)

Définition du coefficient de transmission Rapport des courants de proba de l'onde transmise et incidente

Microscopie à effet tunnel, que ce passe-t-il pour les bandes d'énergie à température non-nulle? Dans un vrai STM, le courant est-il purement unidirectionnel? Quand température non nulle, statistique de Fermi-Dirac

Autre technique que le microscope à effet tunnel pour sonder les surfaces et qui n'utilise pas les propriétés électriques des métaux?

Quelles conséquences si on considère un puits de potentiel au lieu d'une barrière de potentiel? Est-ce incohérent avec la mécanique classique?

Interprétation de AI ? En termes de flux de particules, expression de AI avec le flux incident

Sources pour les ODG (lecture, écriture des disques durs)? Recherche actuelle, thèses. Dépend aussi des marques, de la mise en réseau des transistors (temps donnés ici pour un seul transistor).

Encore d'autres idées d'applications/apparitions de l'effet tunnel?

Effet tunnel et paquet d'onde ? On peut parler de la prototropie, des réactions chimiques, Changement de conformation de l'ammoniac. (Voir Diane Carrera)

Est-ce que le changement de conformation est seulement du à l'effet tunnel? Si on chauffe beaucoup, kT peut devenir supérieur à la barrière de potentiel.

Même question pour la particule alpha, peut-elle s'échapper autrement que par effet tunnel? On peut réexpliquer l'effet tunnel par de la physique statistique, une grosse variation qui donne assez d'energie pour passer la barrière. Cependant, il y a alors des effets cinétiques, de relaxation qui justifient que ce n'est pas suffisant.

Lien entre jonction Josephson et effet tunnel.