

Sommaire

I	Modélisation de l'effet tunnel	2
II	Résolution de l'équation de Schrödinger stationnaire	2
II.1	Formes des parties spatiales des fonctions d'onde	2
II.2	Application des conditions limites	3
III	Coefficient de transmission	4
III.1	Définition et expression dans le cas d'une barrière de potentiel quelconque	4
III.2	Cas particulier de la barrière épaisse	5
IV	Applications concrètes de l'effet tunnel	5

Questions de cours

- Effet tunnel : forme du potentiel, définition de l'effet tunnel, applications. Donner la forme des fonctions d'onde dans chaque région en les interprétant.
- Définir le coefficient de probabilité associé à une particule libre incidente sur une barrière de potentiel et le relier aux fonctions d'onde des particules incidente et transmise.

- On donne le coefficient de transmission $T = \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-\frac{2a}{\delta}}$ pour une barrière épaisse.

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

- ★ *Prise de notes* : Comment voir les atomes ?
<https://toutestquantique.fr/tunnel/>

Ce chapitre a trois objectifs principaux :

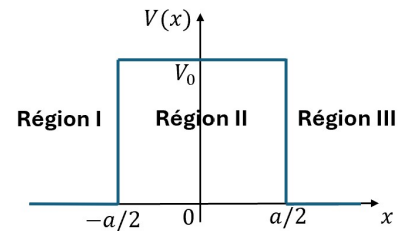
1. Écrire et interpréter la forme des fonctions d'onde d'un état stationnaire suivant la valeur de l'énergie E de la particule par rapport à la valeur constante du potentiel dans la région considérée.
2. Définir et interpréter le coefficient de transmission associé à une particule incidente sur une barrière de potentiel.
3. Citer des applications de l'effet tunnel.

Dans ce chapitre, on se limite (toujours) à l'étude spatiale (selon une seule dimension cartésienne x) et temporelle de particules matérielles de masse m évoluant dans un potentiel d'énergie $V(x)$.

I Modélisation de l'effet tunnel

Dans ce chapitre, on étudie une particule incidente envoyée depuis $x = -\infty$ sur une barrière de potentiel $V(x)$ de la forme :

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



Analyse du mouvement de la particule dans le cadre de la physique classique :

- Si l'énergie mécanique $E > V_0$, alors la particule franchit la barrière de potentiel (elle est dans un état de diffusion).
- ★ Si l'énergie mécanique $0 < E < V_0$, alors la particule rebrousse chemin pour $x = -a/2$: on dit qu'elle a été réfléchiée par la barrière de potentiel. (On parle aussi d'état de diffusion.)

En mécanique quantique, pour un état stationnaire d'énergie E :

- Si $E > V_0$, alors la particule a une probabilité non nulle de traverser la barrière et une probabilité non nulle d'être réfléchiée par la barrière.
- Si $0 < E < V_0$, alors la particule a une probabilité non nulle d'être réfléchiée. Mais, de même que pour le puits de potentiel fini, la fonction d'onde de la particule dans la région II sera décrite par une superposition d'ondes évanescentes : il existe une probabilité non nulle de détecter la présence de la particule après le puits ! C'est ce dernier cas qui porte le nom d'**effet tunnel**.

Effet tunnel

L'effet tunnel caractérise la probabilité non nulle de transmission d'une particule incidente d'énergie $0 < E < V_0$ à travers une barrière de potentiel de hauteur V_0 .

Dans toute la suite, nous nous limiterons à l'étude de l'effet tunnel et supposerons donc que $0 < E < V_0$.

II Résolution de l'équation de Schrödinger stationnaire

II.1 Formes des parties spatiales des fonctions d'onde

On rappelle l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x)\psi(x,t)$$

Le potentiel $V(x)$ étant stationnaire, on cherche $\psi(x,t)$ sous la forme d'un état stationnaire :

$\psi(x,t) = \Phi(x) e^{-\frac{iEt}{\hbar}} = \Phi(x) e^{-i\omega t}$ avec $E = \hbar\omega$ l'énergie de l'état stationnaire (qui est donc une constante, quelque que soit la région du puits de potentiel) et $\Phi(x)$ vérifiant l'équation de Schrödinger stationnaire :

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

Dans les régions I et III :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Phi}{dx^2} = E\Phi(x) \Rightarrow \frac{d^2\Phi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \Phi(x) = 0$$

Dans la région II :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Phi}{dx^2} + V_0\Phi(x) = E\Phi(x) \Rightarrow \frac{d^2\Phi}{dx^2} - \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} \Phi(x) = 0$$

On pose $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} > 0$ et $q = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} > 0$.

Exercice : Déterminer les formes des parties spatiales $\Phi_1(x)$, $\Phi_2(x)$ et $\Phi_3(x)$ dans les trois régions de l'espace en fonction de k , q et de constantes complexes. En déduire alors les formes des fonctions d'ondes $\psi_1(x,t)$, $\psi_2(x,t)$ et $\psi_3(x,t)$.

★

$$\begin{cases} \Phi_1(x) = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} \\ \Phi_2(x) = A_2 e^{qx} + B_2 e^{-qx} \\ \Phi_3(x) = A_3 e^{ikx} + B_3 e^{-ikx} \end{cases}$$

avec toutes les constantes étant a priori complexes.

Pour Φ_2 , on peut aussi prendre la forme avec cosh et sinh, ne change rien.

Interprétations :

★

- $\psi_1(x,t) = \psi_i(x,t) + \psi_r(x,t)$ est la superposition de deux OPH contra-propageantes. $\psi_i(x,t) = A_1 e^{-i(\omega t - kx)}$ se propage dans le sens des x croissants et modélise donc la particule incidente. $\psi_r(x,t) = B_1 e^{-i(\omega t + kx)}$ se propage dans le sens des x décroissants et modélise donc la particule réfléchie.
- Même principe pour $\psi_3(x,t)$: $\psi_t(x,t) = A_3 e^{-i(\omega t - kx)}$ modélise la particule transmise, alors que $B_3 e^{-i(\omega t + kx)}$ modélise une particule arrivant de $x = +\infty$ vers la barrière de potentiel. Dans notre modélisation de l'effet tunnel, nous considérons que la seule particule incidente arrive de $x = -\infty$ (pas de source de particule en $x = +\infty$). Donc, on impose $B_3 = 0$. Ainsi, $\psi_3(x,t) = \psi_t(x,t)$.
- $\psi_2(x,t)$ est la superposition de deux ondes évanescentes de profondeur de pénétration $\delta = \frac{1}{q} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$.

Dans la suite, on considérera donc :

$$\begin{cases} \Phi_1(x) = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} \\ \Phi_2(x) = A_2 e^{qx} + B_2 e^{-qx} \\ \Phi_3(x) = A_3 e^{ikx} \end{cases}$$

Remarque : Le fait de n'avoir qu'une seule source de particule du côté $x = -\infty$ brise la symétrie du problème : on ne peut donc pas imposer que la fonction d'onde soit symétrique ou antisymétrique ici.

II.2 Application des conditions limites

Exercice : Ecrire les conditions limites du problème. En déduire si les énergies des états stationnaires sont quantifiées.

CL en $x = a/2$:

$$A_2 e^{qa/2} + B_2 e^{-qa/2} = A_3 e^{ika/2} \quad \text{et} \quad q \left(A_2 e^{qa/2} - B_2 e^{-qa/2} \right) = k A_3 e^{ika/2}$$

CL en $x = -a/2$:

★

$$A_1 e^{-ika/2} + B_1 e^{ika/2} = A_2 e^{-qa/2} + B_2 e^{qa/2} \quad \text{et} \quad k \left(A_1 e^{-ika/2} - B_1 e^{ika/2} \right) = q \left(A_2 e^{-qa/2} - B_2 e^{qa/2} \right)$$

Quelles que soient les valeurs de k et de q , on peut exprimer toutes les constantes en fonction de A_3 . Il n'y a pas de quantification de k et de q , et donc pas de quantification des énergies des états stationnaires. On parle de continuum d'énergies. (Cohérent avec l'absence d'état lié !)

Comme dans le cas d'une particule libre, on remarque qu'il est impossible de normaliser la fonction d'onde choisie dans ce problème. Cela provient du fait qu'une particule incidente ne peut pas réellement être décrite par une OPH. Nous ne chercherons donc pas à normaliser la fonction d'onde lorsque l'étude concerne une particule incidente venant de $\pm\infty$.

III Coefficient de transmission

III.1 Définition et expression dans le cas d'une barrière de potentiel quelconque

Définition du coefficient de transmission

On définit le coefficient de transmission T associé à une particule libre incidente sur une barrière de potentiel comme un rapport de courants de probabilités :

$$T = \frac{j_t}{j_i}$$

On oriente les courants dans le sens des x croissants.

Les fonctions d'onde $\psi_i(x,t)$ et $\psi_t(x,t)$ modélisant des particules libres, on peut utiliser l'expression des courants de probabilités démontrée au chapitre MQ1 :

$$j_i = |\psi_i(x,t)|^2 \times v_g = |\psi_i(x,t)| \frac{\hbar k}{m} = |A_1|^2 \frac{\hbar k}{m}$$

★

$$\text{et } j_t = |A_3|^2 \frac{\hbar k}{m}.$$

Ainsi :

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

Sens physique associé au coefficient de transmission :

Par définition, le courant de probabilité $j = \frac{\delta P}{dt}$ est le rapport de la probabilité qu'une particule traverse une abscisse x durant dt et cette durée dt . Ainsi, le coefficient de transmission s'interprète comme :

$$T = \frac{\text{probabilité qu'une particule traverse la barrière durant } dt}{\text{probabilité qu'une particule arrive à la barrière durant } dt}$$

On a donc forcément $0 \leq T \leq 1$.

Expression admise du coefficient de probabilité :

Fondamentalement, on pourrait mener les calculs et déterminer l'expression de $T = \left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2 \dots$ mais

c'est fastidieux (et hors programme). On va donc plutôt admettre que, tous calculs faits :

$$T = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \sinh^2(qa)} = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \sinh^2\left(\frac{a}{\delta}\right)}$$

en posant $\delta = \frac{1}{q} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$ la profondeur de pénétration dans la barrière.

Interprétations :

Pour la plupart des interprétations et applications numériques, on pourra remarquer que le rapport $\frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)}$ varie assez peu avec V_0 et E devant la variation de $\sinh^2\left(\frac{a}{\delta}\right)$.

- $T \neq 0$: une particule quantique a une probabilité non nulle de traverser la barrière de potentiel par effet tunnel !
- ★ T augmente si a diminue (barrière moins large) et si δ augmente (les ondes évanescentes décroissent moins vite dans la région II). On remarque que δ augmente si V_0 diminue (barrière moins haute) et si m diminue (effet quantique important pour les faibles masses).

Remarque : On pourrait de même définir un coefficient de réflexion associé à une particule incidente sur une barrière de potentiel : $R = \frac{j_r}{j_i}$ avec j_r le courant de probabilité associé à la particule réfléchi. Nécessairement, comme une particule incidente est soit réfléchi, soit transmise, on doit trouver $R+T = 1$.

III.2 Cas particulier de la barrière épaisse

On parle de barrière épaisse si $a \gg \delta$. Dans ce cas, le coefficient de transmission est forcément faible devant 1. On peut alors simplifier l'expression précédente de T .

On a $\sinh(a/\delta) \sim \frac{e^{a/\delta}}{2}$. Ainsi :

★

$$T \sim \frac{4E(V_0 - E) \times 2^2}{V_0^2 e^{2a/\delta}} = \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-\frac{2a}{\delta}}$$

La décroissance exponentielle qui caractérise T est directement liée à l'existence d'une onde évanescente dans la barrière de potentiel.

Ordres de grandeurs : A partir de m , V_0 , $E = \frac{V_0}{2}$ et a , on peut alors calculer δ et T .

Particule	m (kg)	V_0 (eV)	a (nm)	δ (nm)	T
Électron	10^{-30}	4	0,3	0,1	10^{-2}
Électron	10^{-30}	40	0,3	4×10^{-2}	10^{-6}
Électron	10^{-30}	4	3	0,1	10^{-20}
Proton	10^{-27}	4	0,3	4×10^{-3}	10^{-63}
Proton	10^{-27}	4	3	2×10^{-3}	10^{-628}

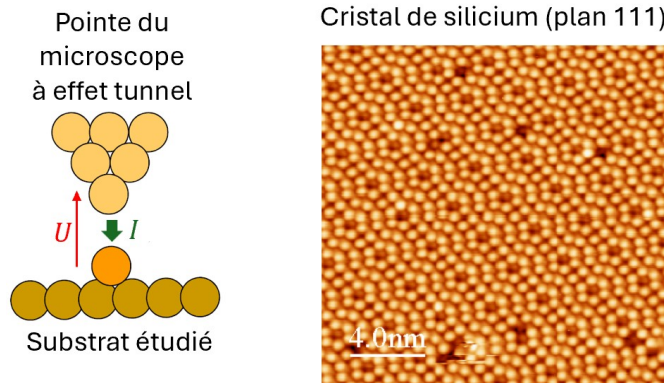
On remarque que les valeurs de T sont (quasiment) toujours très faibles.

On retrouve les commentaires précédents : T augmente si la largeur de la barrière diminue, si la hauteur de la barrière diminue et si la masse des particules est faible.

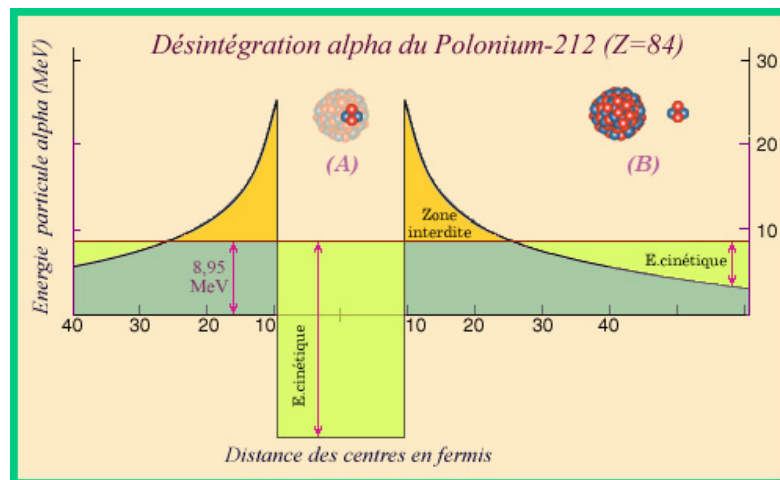
IV Applications concrètes de l'effet tunnel

Il existe de nombreuses applications de l'effet tunnel.

- L'application technologique peut-être la plus belle de l'effet tunnel est le microscope à effet tunnel (Scanning Tunneling Microscope STM), conçu par Binnig et Rohrer en 1984 (<https://toutestquantique.fr/tunnel/>). Une tension U est appliquée entre la pointe du microscope et le substrat à étudier. On mesure alors le courant tunnel I associé au passage des électrons du substrat à la pointe par effet tunnel (les électrons traversent la barrière de potentiel formée par l'air). Ce microscope peut alors permettre d'imager la densité électronique d'un substrat, et ainsi de "voir les atomes" (à droite : image expérimentale de Heejun Yang, Orsay).



- L'effet tunnel permet de modéliser de manière simpliste la désintégration radioactive α de certains noyaux. Gamow propose en 1928 un modèle de potentiel simplifié pour modéliser l'interaction d'une particule alpha (deux protons et deux neutrons) avec un noyau. Initialement, la particule alpha est dans un état lié du puits de potentiel formé par le noyau. Cette particule peut traverser la barrière de potentiel par effet tunnel pour être détectée hors du puits de potentiel. On dit alors que le noyau a émis une particule alpha par désintégration radioactive.



- Les clés USB, et de manière générale les mémoires flash, utilisent l'effet tunnel pour écrire ou lire de manière très rapide l'information contenue dessus.