

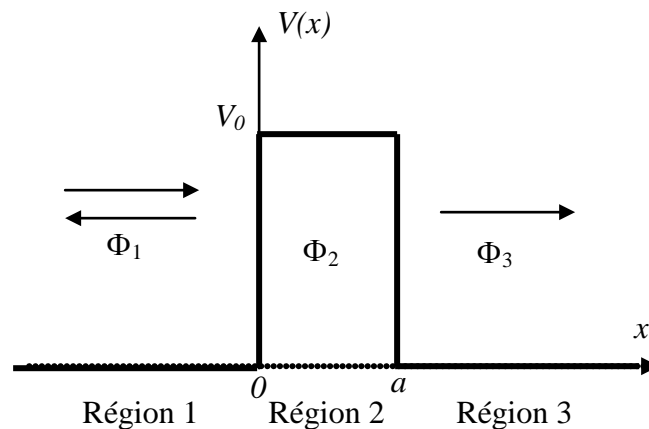
## Devoir/lecture 1

### ÉTATS DE DIFFUSION D'UNE BARRIÈRE : EFFET TUNNEL

L'effet tunnel est un effet intervenant en de très nombreuses occasions en physique, ainsi qu'il sera illustré en cours et petites classes (PC 4 notamment).

On s'intéresse à une particule d'énergie  $E$ , venant des  $x < 0$ , et diffusée par la barrière suivante :

$x < 0$  (région 1) :  $V = 0$ .       $0 < x < a$  (région 2) :  $V = V_0 > 0$        $x > a$  (région 3) :  $V = 0$



On posera :  $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ ,  $k \in \mathbb{R}^+$        $\sigma = \frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2}$

Pour  $0 < E < V_0$  :  $\beta = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$ ,  $\beta \in \mathbb{R}^+$

Pour  $E > V_0$  :  $k' = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}}$ ,  $k' \in \mathbb{R}^+$

1. Rappeler d'abord la situation classique, selon que  $E$  est inférieure ou supérieure à  $V_0$ .

2.  $0 < E < V_0$

2.a Poser le problème quantique, c'est-à-dire écrire l'équation aux valeurs propres pour l'énergie dans les différentes régions. Montrer que la solution est de la forme :

$$\begin{aligned} x < 0 : & \quad \Phi_1(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx} \\ 0 < x < a : & \quad \Phi_2(x) = C e^{\beta x} + D e^{-\beta x} \\ x > a : & \quad \Phi_3(x) = F e^{ik(x-a)} + G e^{-ik(x-a)} \end{aligned}$$

2.b Calculer la densité de courant dans les régions 1 et 3 et montrer que chaque exponentielle complexe dans ces régions peut être interprétée comme la fonction d'onde d'un flux monocinétique permanent de particules. En déduire que  $G$  est nul, et que l'on peut choisir  $A$  (donnée expérimentale).

On définit alors  $\rho = B/A$  et  $\tau = F/A$ , coefficients de réflexion et de transmission en amplitude, respectivement.

2.c Ecrire les conditions aux limites et montrer que l'on peut déterminer les constantes manquantes.

Après élimination de  $C$  et  $D$ , on trouve :

$$\rho = -\frac{2(k^2 + \beta^2) \sinh \beta a}{(ik - \beta)^2 e^{\beta a} - (ik + \beta)^2 e^{-\beta a}} \quad \tau = \frac{4ik\beta}{(ik - \beta)^2 e^{\beta a} - (ik + \beta)^2 e^{-\beta a}}$$

2.d Définir et déterminer les coefficients de réflexion et de transmission  $R$  et  $T$  en flux, en fonction de  $\sigma$  et de la variable sans dimension  $\varepsilon = \frac{E}{V_0}$ . Vérifier que  $R + T = 1$ .

3.  $E > V_0$

Reprendre le problème quantique dans ce cas, et déterminer à nouveau  $R$  et  $T$ . Montrer que les cas où  $T = 1$  s'interprètent aisément par la condition d'interférence constructive pour les ondes sortantes.

4. Tracer approximativement l'évolution de  $T(\varepsilon)$ , où  $\varepsilon = E/V_0$ , et comparer au cas classique.

5. Il est évident que les états trouvés appartiennent au spectre continu et ne sont pas de carré sommable. Comment peut-on constituer des états physiques pour une particule unique ?

6. Décrire qualitativement ce qui se passe lorsqu'on a affaire à une marche de potentiel plutôt qu'une barrière (échelon de hauteur  $V_0$  pour  $x > 0$ , et pas de région 3). En particulier, que dire du coefficient  $R$  dans les deux cas  $E < V_0$  et  $E > V_0$  ?

## REPONSES

1. Classiquement, si  $E < V_0$ , toute particule qui arrive sur la barrière avec la vitesse  $\sqrt{2mE}$  est réfléchi (avec la même vitesse). Si  $E > V_0$ , la particule est brutalement décélérée en  $x = 0$ , sa vitesse passe de  $\sqrt{2mE}$  à  $\sqrt{2m(E - V_0)}$ , puis reprend sa vitesse en  $x = a$  ; elle est transmise.

2.a L'équation aux valeurs propres du hamiltonien s'écrit :

$$\text{Régions 1 et 3 :} \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \Phi'' + 0 = E \Phi, \text{ soit : } \Phi'' = -k^2 \Phi$$

$$\text{Région 2 :} \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \Phi'' + V_0 \Phi = E \Phi, \text{ soit : } \Phi'' = +\beta^2 \Phi$$

D'où la solution générale proposée (en choisissant la phase nulle en  $x = a$  pour les exponentielles de  $\Phi_3$ ).

2.b Comme on l'a déjà vu,  $e^{\pm ikx}$  n'est pas de carré sommable sur un domaine infini, et ne peut donc être un état physique d'une particule unique. Une particule unique dans la région 1 à un instant  $t$  devra donc avoir pour fonction d'onde une combinaison linéaire de ces exponentielles, de telle sorte qu'elle soit de carré sommable (cette combinaison linéaire est en fait une somme continue sur  $k$ , puisque  $E$ , et donc  $k$ , ne sont pas quantifiés ; voir question 5).

La solution générale proposée s'interprète alors de la façon suivante :

Remarquons tout d'abord que chaque exponentielle complexe ( $e^{ikx}$  et  $e^{-ikx}$ ) est aussi fonction propre de l'opérateur quantité de mouvement  $p = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$  (valeur propre  $+\hbar k$  et  $-\hbar k$  respectivement).

La densité de courant s'écrit (cours §2.3) :  $j = -\frac{i\hbar}{2m} \left( \Phi^* \frac{d\Phi}{dx} - \Phi \frac{d\Phi^*}{dx} \right)$

Dans la région 1, où la fonction d'onde s'écrit :  $\Psi_1(x, t) = \Phi_1(x) e^{-iEt/\hbar}$ , cette densité vaut, les exponentielles temporelles disparaissant :

$$j_1 = -\frac{i\hbar}{2m} \left[ (A^* e^{-ikx} + B^* e^{+ikx}) ik (A e^{+ikx} - B e^{-ikx}) - (A e^{+ikx} + B e^{-ikx}) ik (-A^* e^{-ikx} + B^* e^{+ikx}) \right]$$

$$\text{Finalement : } j_1 = \frac{\hbar k}{m} AA^* - \frac{\hbar k}{m} BB^* = j_+ - j_-$$

$$\text{De même dans la région 3, } j_3 = \frac{\hbar k}{m} FF^* - \frac{\hbar k}{m} GG^*$$

Il est alors légitime de considérer  $Ae^{ikx}$  comme la fonction d'onde d'un faisceau incident de particules, d'intensité  $j_+$ , abordant la barrière (les particules ayant toutes la même vitesse, donnée par  $p = +\hbar k$ ) ;  $Be^{-ikx}$  correspond au faisceau réfléchi ( $p = -\hbar k$ ), et  $Fe^{ikx}$  correspond au faisceau transmis.  $G$  est nécessairement nul, traduisant l'absence de faisceau venant des  $x$  positifs. Enfin,  $A$  est une donnée de l'expérience, définie par l'intensité  $j_+$  du faisceau incident ; concrètement,  $AA^*$  apparaît comme la densité  $N$  de particules du faisceau incident, puisque  $j_+$  est cette densité multipliée par le volume parcouru en une seconde :

$$N \cdot \frac{\hbar k}{m} \cdot (S=1) = j_+ = AA^* \hbar k / m$$

A noter que ces faisceaux sont des faisceaux permanents, car les états  $\Phi$  sont des états stationnaires :  $\Psi\Psi^* = \Phi e^{iEt/\hbar} \Phi^* e^{-iEt/\hbar} = \Phi\Phi^* = cste \quad \forall t$

2.c  $\Phi_1, \Phi_2, \Phi_3$  sont des expressions mathématiques d'une même fonction d'onde, dont on doit assurer la continuité en tout point, ainsi que celle de sa dérivée. Et donc :

$$\Phi_1(0) = \Phi_2(0), \quad \Phi_2(a) = \Phi_3(a), \quad \Phi_1'(0) = \Phi_2'(0), \quad \Phi_2'(a) = \Phi_3'(a)$$

Ce qui donne :

$$A + B = C + D \quad C e^{\beta a} + D e^{-\beta a} = F \quad i k (A - B) = \beta (C - D) \quad \beta (C e^{\beta a} - D e^{-\beta a}) = i k F$$

Après division par  $A$ , on obtient un système linéaire de 4 équations à 4 inconnues :  $\rho, C/A, D/A, \tau$ . Il est aisément soluble et on trouve notamment ( $C$  et  $D$  ne nous intéressent pas ici) :

$$\rho = -\frac{2(k^2 + \beta^2)sh\beta a}{(ik - \beta)^2 e^{\beta a} - (ik + \beta)^2 e^{-\beta a}} \quad \tau = \frac{4ik\beta}{(ik - \beta)^2 e^{\beta a} - (ik + \beta)^2 e^{-\beta a}}$$

2.d Par définition,  $R = \frac{\text{flux réfléchi}}{\text{flux incident}} = \frac{j_-}{j_+}$  et donc :  $R = \frac{B B^*}{A A^*} = \rho \rho^*$

De même :  $T = \frac{\text{flux transmis}}{\text{flux incident}} = \frac{F F^*}{A A^*} = \tau \tau^*$

En introduisant  $\sigma = \frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2}$  et  $\varepsilon = \frac{E}{V_0} = \frac{k^2}{k^2 + \beta^2}$ , il vient ( $\varepsilon < 1$ ) :

$$R(\varepsilon) = \frac{1}{1 + \frac{4\varepsilon(1-\varepsilon)}{sh^2\sqrt{\sigma(1-\varepsilon)}}} \quad \text{et} \quad T(\varepsilon) = \frac{1}{1 + \frac{sh^2\sqrt{\sigma(1-\varepsilon)}}{4\varepsilon(1-\varepsilon)}}$$

En remarquant que  $R(\varepsilon) = \frac{1}{1+U}$  et  $T(\varepsilon) = \frac{1}{1+1/U} = \frac{U}{1+U}$ , il vient  $R + T = 1$ ,

relation qui traduit tout simplement la conservation de la matière : toutes les particules sont soit transmises, soit réfléchies, aucune ne disparaît. Cette relation pouvait d'ailleurs être obtenue plus rapidement à partir de l'équation de continuité 2.12 du cours, qui montre que la densité de courant est la même dans les 3 régions (car la fonction d'onde est stationnaire ; il suffit alors d'écrire  $j_1 = j_3$ ).

Contrairement au cas classique,  $T$  n'est pas nul pour  $E < V_0$ . Une (faible) proportion de particules est transmise, bien que leur énergie soit réputée inférieure à la hauteur de la barrière. D'où l'image (inexacte) du passage *sous* la barrière : l'effet tunnel.

Cet effet est notamment utilisé dans le microscope à effet tunnel, les particules étant des électrons ; très grossièrement, la barrière de potentiel est le vide existant entre une sonde métallique en forme de pointe et un échantillon à examiner.  $T$  non nul se manifeste par un "courant tunnel" très faible (typiquement le nanoampère), fortement dépendant de l'épaisseur  $a$  de la barrière, c'est-à-dire de la distance pointe – échantillon. Lorsqu'on déplace la pointe au dessus de l'échantillon, on peut tout d'abord asservir son altitude de manière à maintenir le courant tunnel constant (c'est-à-dire  $a$ ), et obtenir ainsi une image de la surface de l'échantillon à l'échelle atomique (résolution verticale de l'ordre de 0,1 angström). Le microscope à effet tunnel fait l'objet de la PC d'application 4.

La fonction d'onde dans la barrière (région 2) est constituée d'exponentielles réelles, ce qui est analogue à une onde évanescence en optique ou électromagnétisme ; cette onde est récupérée dans la région 3 (même indice de réfraction que la région 1) pour donner naissance à une onde sortante qui se propage (exponentielle complexe).

3. Il n'est pas nécessaire de refaire les calculs dans le cas  $E > V_0$  ; il suffit de remplacer  $\beta$  par  $ik'$  dans les résultats précédents ; on obtient ainsi

$$\rho = \frac{2i(k^2 - k'^2)\sin k'a}{(k - k')^2 e^{ik'a} - (k + k')^2 e^{-ik'a}} \quad \tau = -\frac{4kk'}{(k - k')^2 e^{ik'a} - (k + k')^2 e^{-ik'a}}$$

Et on en tire ( $\varepsilon > 1$ ) :

$$R(\varepsilon) = \frac{1}{1 + \frac{4\varepsilon(\varepsilon - 1)}{\sin^2 \sqrt{\sigma(\varepsilon - 1)}}} \quad \text{et} \quad T(\varepsilon) = \frac{1}{1 + \frac{\sin^2 \sqrt{\sigma(\varepsilon - 1)}}{4\varepsilon(\varepsilon - 1)}}$$

Et bien sûr,  $R + T = 1$ .

La fonction d'onde dans la région 2 est constituée également d'exponentielles complexes :

$$\Phi_2(x) = C e^{ik'x} + D e^{-ik'x}$$

Cette fois, bien que l'énergie soit supérieure à la hauteur de la barrière, tout n'est pas nécessairement transmis, sauf lorsque  $T = 1$ , ce qui est obtenu pour :

$$\sqrt{\sigma(\varepsilon - 1)} = n\pi$$

C'est-à-dire, en introduisant l'impulsion  $p$  de la particule dans la barrière par  $E = \frac{p^2}{2m} + V_0$  :

$$\sqrt{\frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2} \left( \frac{E}{V_0} - 1 \right)} = \frac{pa}{\hbar} = n\pi$$

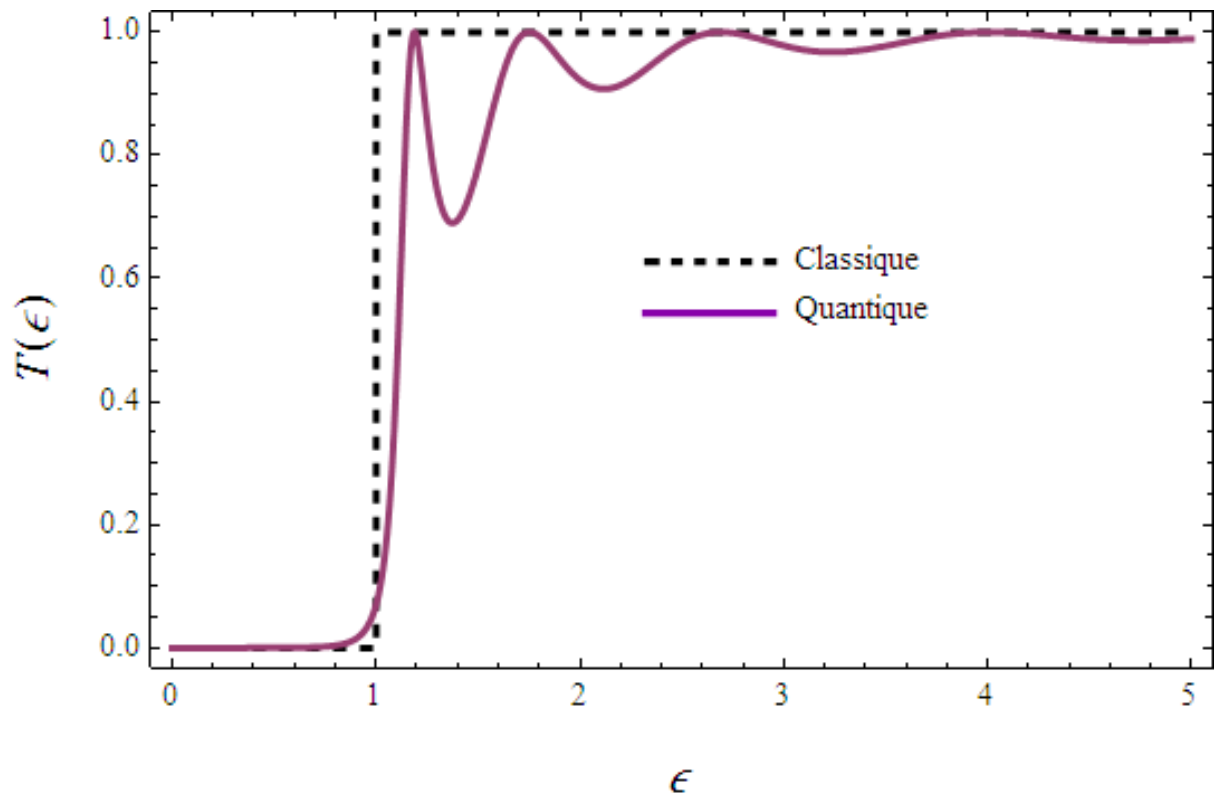
Soit encore, en introduisant la longueur d'onde de De Broglie correspondante  $\lambda = \frac{2\pi}{k'} = \frac{h}{p}$  :

$$a = n \frac{\lambda}{2}$$

Ainsi le coefficient de transmission vaut-il 1 quand l'épaisseur de la barrière contient un nombre entier de demi-longueurs d'onde. Ceci est tout à fait analogue à ce qui se passe pour un interféromètre de Fabry-Pérot (constitué, on le sait, de 2 miroirs semi réfléchissants) : le coefficient de transmission vaut 1 quand la distance entre miroirs contient un nombre entier de demi-longueurs d'onde (les 2 réflexions n'ajoutent pas de déphasage supplémentaire). C'est simplement la condition d'interférence constructive pour les rayons sortants.

4. La figure suivante donne l'évolution du coefficient de transmission  $T$  en fonction de  $\varepsilon$ , c'est-à-dire de l'énergie incidente rapportée à la hauteur de la barrière. Elle a été tracée pour des valeurs réalistes :

$$m = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg (électron)}, V_0 = 2 \text{ eV et } a = 1 \text{ nm, soit } \sigma = 52,8$$



5. Pour une particule unique, il faut rechercher une fonction d'onde de carré sommable, combinaison linéaire des états propres précédemment trouvés ;  $E$  n'étant pas quantifiée, la fonction sera de la forme (voir PC sur le paquet d'ondes) :

$$\Psi(x, t) = \int_E c(E) \Psi_E(x, t) dE, \text{ avec } \Psi_E(x, t) = \Phi_j(x, E) e^{-iEt/\hbar} \text{ dans la région } j.$$

$c(E)$  sera choisi de telle sorte à normer la fonction d'onde, et à la rendre spatialement relativement étroite à l'instant initial, où la particule est dans la région 1, à peu près localisée. L'évolution ultérieure d'un tel paquet d'ondes montre tout d'abord une "bosse" s'approchant de la barrière, puis deux bosses s'en éloignant, l'une transmise, l'autre réfléchie ; de plus, ces bosses s'étalent dans le temps.

Une belle illustration de ce phénomène (et d'autres) est visible sur le site :

<http://www.quantum-physics.polytechnique.fr/> ; choisir la version (F ou GB), l'onglet 1.5, puis lancer l'animation, et observer l'évolution du paquet d'onde dans les différents cas proposés.

6. Dans le cas d'une marche de potentiel :

a)  $E < V_0$

Rien de changé coté  $x < 0$ , la solution est constituée d'exponentielles complexes, tandis que coté  $x > 0$ , la fonction d'onde est de la forme  $\Phi_2(x) = D e^{-\beta x}$  ( $C$  est nul pour que  $\Phi_2$  reste finie).  $\Phi_2$  s'annulant à l'infini, on peut donc prévoir que toutes les particules sont finalement réfléchies (le calcul montre en effet que  $R = 1$ ), mais contrairement au cas classique, cette réflexion n'est pas localisée sur le front  $x = 0$  ; des particules peuvent transiter à l'intérieur de la marche ( $DD^* e^{-2\beta x} \neq 0$ ).

b)  $E > V_0$

La solution est constituée d'exponentielles complexes dans les deux régions :

$$\begin{aligned} x < 0 : \quad & \Phi_1(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx} \\ x > 0 : \quad & \Phi_2(x) = C e^{ik'x} + D e^{-ik'x} \end{aligned}$$

Des quatre coefficients, seul D est nul (comme G à la question 2b). On en conclut qu'il y a réflexion d'une partie des particules ; le calcul donne en effet  $R = \frac{BB^*k}{AA^*k} = \left( \frac{k - k'}{k + k'} \right)^2 \neq 0$  et  $T = \frac{CC^*k'}{AA^*k} = \frac{4kk'}{(k + k')^2}$  (et bien sûr  $R + T = 1$ ). Classiquement, toutes les particules seraient transmises.