

## TD no 5

### Effet tunnel et microscopie

#### Résumé

Dans ce TD nous abordons le principe de l'effet tunnel dont l'origine est purement quantique. Cet effet permet à des particules quantiques (ici des électrons) de traverser une barrière de potentielle plus haute que leur énergie propre. Une application très importante de l'effet tunnel est le microscope à effet tunnel dont nous décrirons succinctement le principe.

## 1 Equation de Schrödinger

Nous considérons une particule de masse  $m$  soumise à une barrière de potentielle de hauteur finie  $V_0$

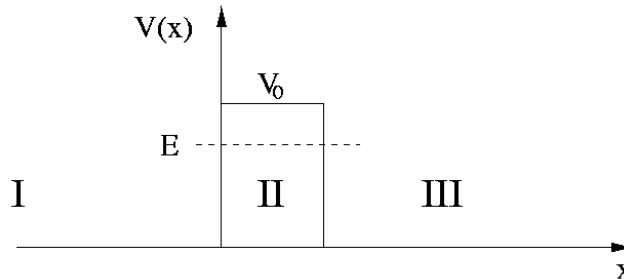


FIG. 1 – Barrière tunnel (zone II) de hauteur  $V_0$  séparant deux électrodes infinies (zones I et III)

**Question no 1 :** Ecrire l'équation de Schrödinger stationnaire pour une énergie  $E$ , vérifiée par la fonction  $\Psi(x)$  dans les intervalles  $[-\infty, 0]$ ,  $[0, a]$  et  $[a, +\infty]$ . Donner la forme des solutions dans chacun des intervalles (On introduira les constantes  $(A_I, B_I)$ ,  $(A_{II}, B_{II})$ ,  $(A_{III}, B_{III})$ , correspondant aux domaines I, II et III). On distinguera les cas où  $E < V_0$  et  $E > V_0$  et on posera :

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad ; \quad k' = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}} \quad ; \quad \rho = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$$

## 2 Calcul du courant

On considère uniquement les électrons se propageant de la "gauche vers la droite". La fonction d'onde dans la zone  $[a, +\infty]$  est donc proportionnelle à  $e^{ikx}$  ( $B_{III} = 0$ )

**Question no 2 :** On rappelle que le courant s'écrit sous la forme

$$j = \frac{i\hbar}{2m} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi)$$

Déterminer les courants incidents, réfléchis et transmis ( $j_i, j_r, j_t$ ) en fonction des coefficients  $A_i$  et  $B_i$ . En déduire les coefficients de réflexion  $R$  et de transmission  $T$  en fonction de ces coefficients.

### 3 Raccordement des fonctions d'onde

**Question no 3 :** Rappeler les conditions de raccordement de la fonction d'onde et de sa dérivée au passage entre les intervalles  $[-\infty, 0]$ ,  $[0, a]$  et  $[a, +\infty]$ . Exprimer explicitement en fonction de  $k, k'$  (ou  $\rho$ ) les coefficients de réflexion  $R$  et de transmission  $T$  dans les deux cas  $E < V_0$  et  $E > V_0$ .

### 4 Coefficient de transmission $T(E)$

#### 4.1 $E > V_0$

**Question no 4 :** Montrez que lorsque  $E > V_0$  le coefficient de transmission  $T$  oscille de façon périodique en fonction de la largeur  $a$  de la barrière, et que pour certaines valeurs de l'énergie la transmission est parfaite.

#### 4.2 $E < V_0$

Le fait surprenant est que dans le cas où  $E < V_0$  le coefficient de transmission est non nul. Autrement dit une particule quantique a une probabilité non nulle de franchir une barrière de potentielle plus grande que sa propre énergie : c'est ce que l'on appelle l'effet tunnel. L'origine de cet effet est facile à comprendre : la fonction d'onde ne s'annule pas dans la région II.

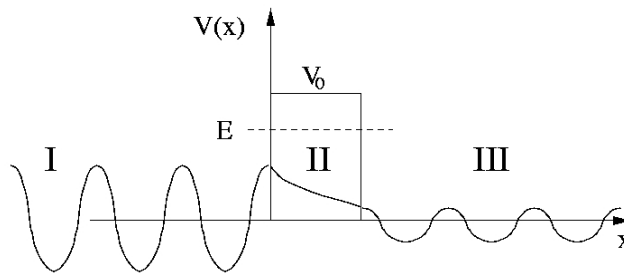


FIG. 2 – Représentation schématique de la fonction d'onde (tunnel) d'une particule d'énergie  $E$  inférieure à la hauteur de la barrière  $V_0$ .

**Question no 5 :** Montrer que dans le cas (fréquent) où  $\rho a \gg 1$ , le coefficient de transmission est proportionnel à  $e^{-2\rho a}$

On peut montrer que pour une barrière de forme quelconque le coefficient de transmission a pour expression approchée :

$$T \propto \exp \left( -2 \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{\frac{2m(V(x) - E)}{\hbar^2}} dx \right)$$

L'effet tunnel a de nombreuses applications en physique quantique. Une des plus importantes est le microscope à effet tunnel. Dans un tel microscope on déplace une pointe très fine près de la surface d'un échantillon conducteur. Les électrons peuvent passer par effet tunnel de la pointe à l'échantillon, ce qui produit un courant macroscopique qui dépend de façon très sensible de la distance entre la pointe et l'échantillon, en raison de la dépendance exponentielle par rapport à la distance. Cela permet de réaliser une cartographie très précise de la surface de l'échantillon, avec une résolution verticale de 0.01nm.

**Question no 6 :** Calculer la variation de courant à travers la pointe d'un microscope à effet tunnel lorsque la distance varie de 0.1nm. ( avec  $V_0 = 6 \text{ eV}$  ;  $a = 1 \text{ nm}$  et  $E = 1 \text{ eV}$ ). Conclusion sur la précision de la technique.

## 5 Quelques images magnifiques

### 5.1 "quantum corral"

A l'aide d'une pointe STM des chercheurs de IBM Almaden ont réussi à manipuler un à un des atomes de fer déposés sur une surface (111) de cuivre, pour former des structures "fermées". Ces objets appelés depuis "corral quantique" <sup>1</sup> engendrent des perturbations oscillantes de la densité électronique à la surface de cuivre.

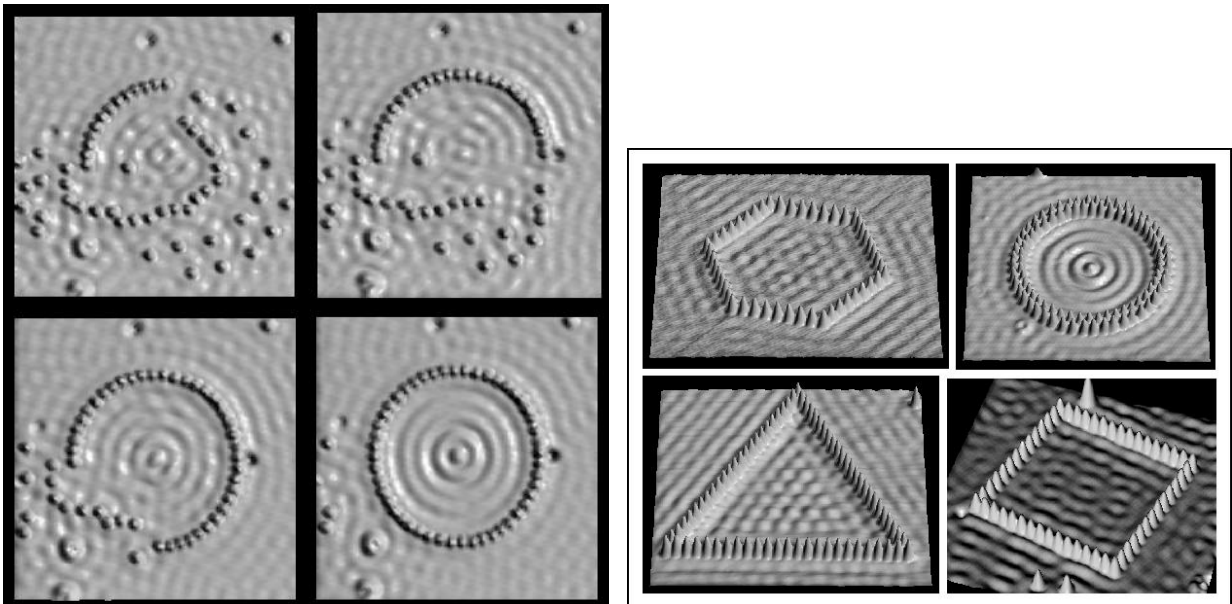


FIG. 3 – Corral quantique

<sup>1</sup>Un corral est un enclos pour le bétail.

## 5.2 Oscillations de Friedel

De manière générale toute perturbation locale d'un système quantique engendre des oscillations de la densité électronique. Ces oscillations appelées oscillations de Friedel apparaissent autour de tout "défaut" dans la "mer" de Fermi, comme illustré sur les images suivantes observées sur la surface (111) du cuivre.

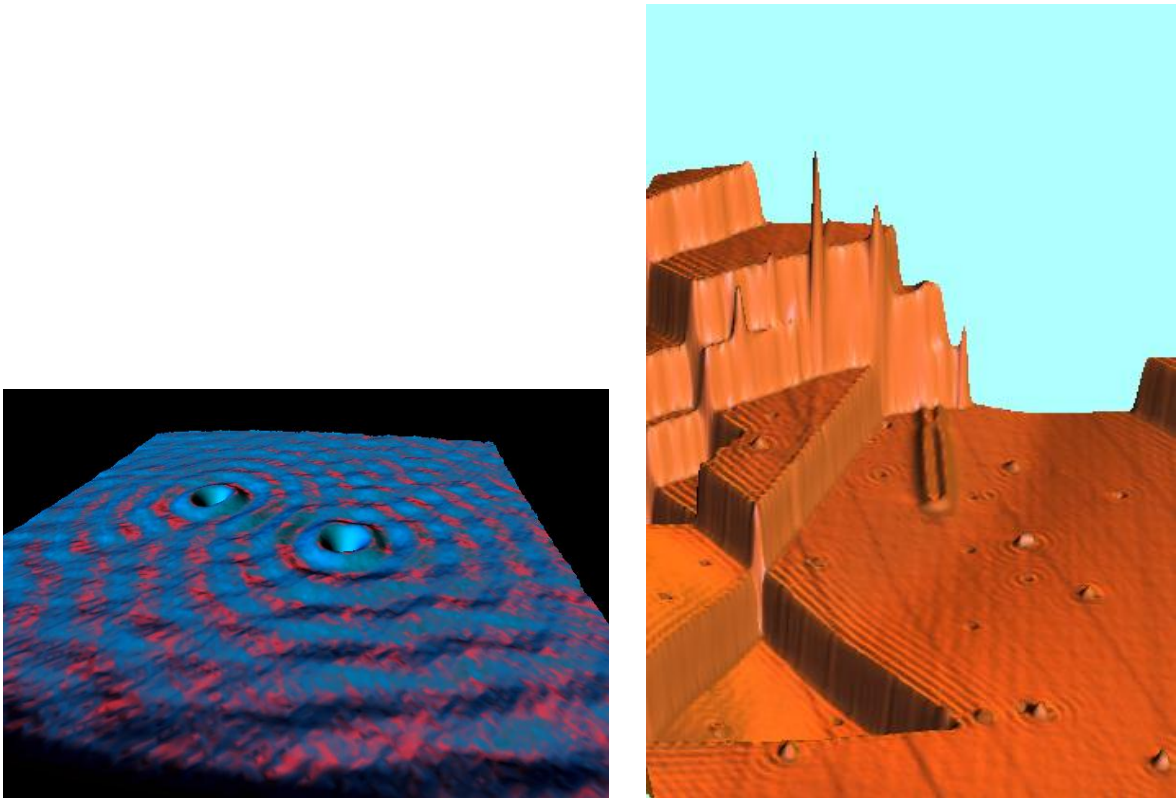


FIG. 4 – Images STM des oscillations de Friedel à la surface du cuivre.