

04/01/16

LP 41 - EFFET TUNNEL

DAHON

François

Allez (Ngo, je suis trop Zener
pour rester assis!

Tojo l'arsouille.

* Niveau : L3

* Commentaires du jury :

- L'effet tunnel n'est pas spécifique à la mécanique quantique.
- Justifier les conditions aux limites, et les relations de continuité.
- Il faut pouvoir minimiser les calculs pouvant être plutôt lourds.
- Présenter d'autres applications que la microscopie et l'émission α (même si le microscope est un bon exemple d'application s'il est analysé avec soin)

* Remarques

J'ai essayé de prendre les commentaires en compte en choisissant comme fil conducteur le microscope à effet tunnel. Cette application présente l'avantage de permettre l'incorporation des grands classiques de l'effet tunnel (barrière tunnel, barrière épaisse, cas général...). Mon objectif fut de traiter au maximum l'aspect technique des applications en gardant du temps pour les discussions liées à l'interprétation du phénomène.

* Prérequis

- Optique ondulatoire
- Statistique quantique
- Onde de matière. Notion de fonction d'onde

* Table des matières

Introduction

I) Microscope à effet tunnel

- 1) Diffusion sur une barrière de potentiel (1D)
- 2) Interprétation et discussion
- 3) Election dans un métal
- 4) Mise en pratique

II) Diodes tunnel

- 1) Diode Esaki
- 2) Diode Zener

Conclusion

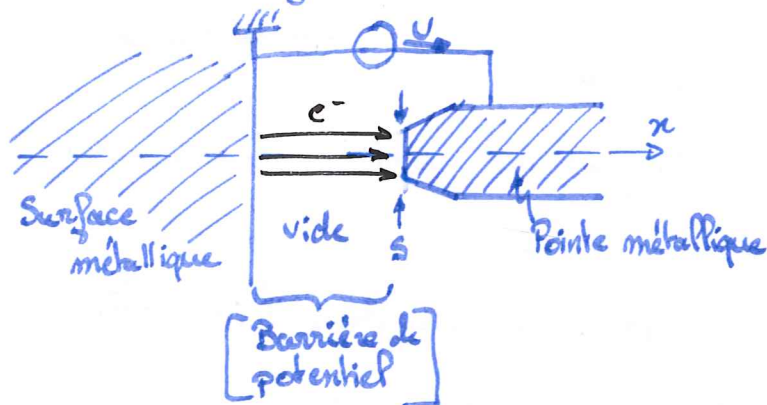
Introduction

①

La dualité onde-corpuscule est, probablement, un des paradigmes les plus emblématiques de la mécanique quantique et est parfaitement illustrée par l'effet tunnel. Une particule diffusant, de par son caractère ondulatoire, a une probabilité non nulle de traverser une barrière de potentiel classiquement impenétrable. Les applications de cet effet ont eu ces dernières décennies un grand impact sur le plan technologique, notamment au travers de composants électroniques comme les diodes tunnel et Zener, ainsi que les transistors à effet de champ (MOSFET) au centre des mémoires flash (RAM, & USB...). Nous allons maintenant nous attacher à l'étude d'une application de l'effet tunnel qui est le microscope à effet tunnel.

I) Microscope à effet tunnel (STM) [1]

La microscopie à effet tunnel a constitué une avancée majeure dans l'exploration et la visualisation de la matière à l'échelle atomique. Les développements de cette technique furent récompensés en 1986 par le prix Nobel de Physique décerné à Binnig et Rohrer (IBM). [Montrer image IBM atomes]



cette méthode de microscopie repose essentiellement sur la détection d'électrons ayant traversé la barrière de potentiel.

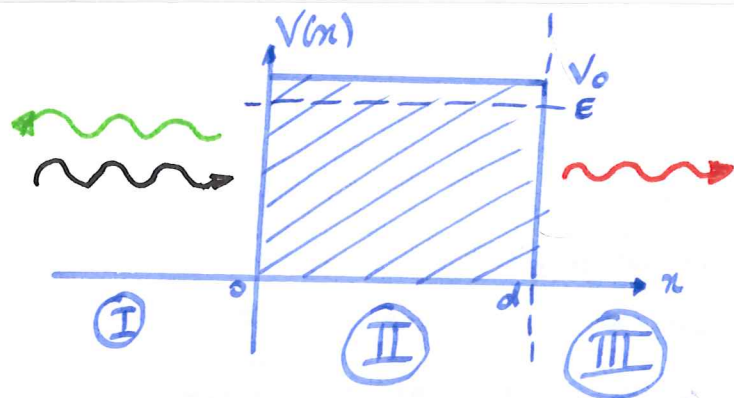
[Montrer la figure]

Observation: Lorsque l'on applique une différence de potentiel entre la surface et la pointe métallique on observe l'apparition d'un courant.

↳ Afin de comprendre ce phénomène on va développer un modèle simple.

1) Diffusion sur une barrière de potentiel (1D) [2]

On considère ici une particule (par ex un électron) de masse m et d'énergie E diffusant de la gauche vers la droite sur une barrière de potentiel $V(x)$. On suppose que celle-ci est libre de tout potentiel à gauche et à droite de la barrière.



$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{si } 0 < x < d \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

L'équation de Schrödinger (stationnaire) s'écrit dans les zones (car E fixé):

① et ③ : $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = E\psi \Leftrightarrow \psi'' + k^2 \psi = 0$ où $k = \sqrt{2mE}/\hbar$

② : $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = (E - V_0)\psi \Leftrightarrow \psi'' + K^2 \psi = 0$

Calcul du coefficient en transmission

• Cas où $E < V_0$: On pose : $K = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$

Les solutions sont alors de la forme :

$$\psi_I(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$$

$$\psi_{II}(x) = C e^{Kx} + D e^{-Kx}$$

$$\psi_{III}(x) = E e^{ikx} + F e^{-ikx}$$

Partie incidente
Partie réfléchie
Partie émergente

Partie "contrôle" : Onde évanescente (exponentiellement décroissante)

Hyp: on considère une incidence gauche $\Rightarrow F = 0$.

→ la continuité de la fonction d'onde impose des conditions aux limites :

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) \quad \text{et} \quad \psi_{II}(d) = \psi_{III}(d)$$

→ On considère l'équation aux valeurs propres intégrée dans l'intervalle $x \in [-\epsilon, \epsilon]$

$$\text{On a: } \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \right) \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx V(x) \psi(x) = \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx E \psi(x)$$

$$\Leftrightarrow \int_{-\epsilon}^{\epsilon} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} dx + \int_{-\epsilon}^{\epsilon} V_0 \psi(x) dx = \int_{-\epsilon}^{\epsilon} E \psi(x) dx$$

lim
 $\epsilon \rightarrow 0$

$$\downarrow$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial}{\partial x} (\psi(0^+) - \psi(0^-))$$

$$\downarrow$$

$$0$$

$$\downarrow$$

$$0$$

$$\Rightarrow \psi_I'(0) = \psi_{II}'(0) \quad \text{et de même autour de } x=d \text{ on a: } \psi_{II}'(d) = \psi_{III}'(d)$$

On peut alors écrire le système :

(2)

$$\left\{ \begin{array}{l} A+B = C+D \quad [1] \\ i k A + i k B = K C - K D \quad [2] \\ C e^{Kd} + D e^{-Kd} = E e^{-i R d} \quad [3] \\ K C e^{Kd} + K D e^{-Kd} = i E R e^{i R d} \quad [4] \end{array} \right\} \begin{array}{l} \text{En } x=0 \\ \\ \text{En } x=d \end{array}$$

$$\Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} K[3]+[4] : 2 K C e^{Kd} = E e^{i R d} (K+i R) \\ i R [1]+[2] : 2 i k A = (i R+K) C + (i R-K) D \\ K[3]-[4] : 2 K D e^{-Kd} = (K-i R) E e^{i R d} \end{array} \right.$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow 2 i k A &= \frac{E}{2} e^{i R d} \left[(i R+K) \left(1 + \frac{i R}{K}\right) e^{-Kd} + (i R-K) \left(1 - \frac{i R}{K}\right) e^{Kd} \right], \\ &= \frac{E}{2} e^{i R d} K \left[\left(1 + \frac{i R}{K}\right)^2 e^{-Kd} - \left(1 - \frac{i R}{K}\right)^2 e^{Kd} \right], \\ &= E e^{i R d} K \left[-\sinh(Kd) + \left(\frac{R}{K}\right)^2 \sinh(Kd) + 2 i \frac{R}{K} \cosh(Kd) \right]. \end{aligned}$$

En prenant le module carré :

$$\begin{aligned} |A|^2 &= \frac{K^2}{2 R^2} |E|^2 \left[\sinh^2(Kd) \left[\left(\frac{R}{K}\right)^4 - 2 \left(\frac{R}{K}\right) + 1 \right] + 4 \left(\frac{K}{R}\right)^2 \cosh^2(Kd) \right], \\ &= \frac{K^2}{2 R^2} |E|^2 \left[4 \left(\frac{R}{K}\right)^2 (1 + \sinh^2(Kd)) + \sinh^2(Kd) \left[\left(\frac{R}{K}\right)^2 - 2 \left(\frac{R}{K}\right)^2 + 1 \right] \right], \\ &= |E|^2 \left[1 + \frac{K^2}{2 R^2} \sinh^2(Kd) \left(1 + \left(\frac{K}{R}\right)^2\right)^2 \right]. \end{aligned}$$

$$\Rightarrow T < \hat{=} \frac{|E|^2}{|A|^2} = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0-E)} \sinh^2(Kd)}, \quad [*]$$

[Transparence : coefficient de transmission au travers de la barrière tunnel]

tel que : $T+R=1$.

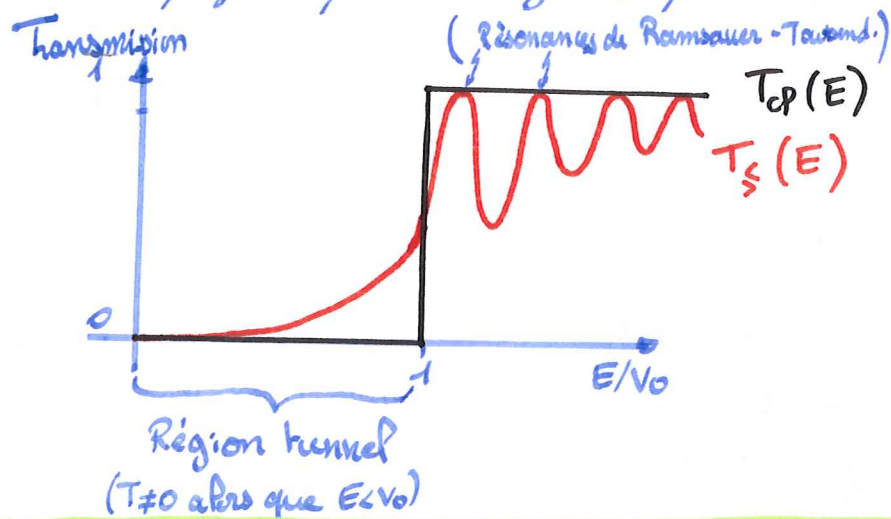
• Cas où $E > V_0$

Dans ce cas $K = \sqrt{2m(E-V_0)}/\hbar$, ainsi on a directement :

$$T > = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(E-V_0)} \sin^2(Kd)}.$$

n.b: On peut utiliser le programme de résolution numérique de l'équation de Schrödinger pour la propagation d'une onde plane, de manière à calculer

le coefficient en transmission et de le comparer à sa valeur théorique. On peut en profiter pour changer les paramètres et discuter les ordres de grandeur.



Pour un électron : $E = 1 \text{ eV}$

$V_0 = 2 \text{ eV}$ et $d = 1 \text{ \AA}$

$\rightarrow T = 78\%$.

Ce phénomène est purement ondulatoire, analogue à un couplage évanescent en optique ondulatoire.

2) Interprétation et discussion [3]

- Nous avons vu dans une précédente leçon que le caractère ondulatoire de la matière conduit à la relation de Heisenberg : $\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar/2$, traduisant le fait qu'un système qui existe durant un temps Δt ne peut avoir une énergie définie à mieux de $\hbar/(2\Delta t)$.

Autrement dit, le principe de conservation de l'énergie est moins strict qu'en mécanique classique (un système quantique peut "changer" d'énergie à condition que l'on ait pas le temps de s'en apercevoir)!

Ceci implique la possibilité pour la particule d'effectuer des transitions vers un état d'énergie $E_i > E$, que l'on qualifie de virtuel, à condition que la durée de transition soit telle que $\Delta t \leq \hbar/(E_i - E)$.

$\rightarrow$ Ici, la particule arrivant de gauche peut réaliser une transition vers un état virtuel d'énergie $E_i \geq V_0$ permettant ainsi de franchir la barrière. La condition est alors que $d < \hbar/K$ de manière à ce que la particule ait le temps de la traverser et de se retrouver de l'autre côté avec une énergie E .

- Par ailleurs, dans un problème de diffusion comme celui-ci, on a vu que ⁽³⁾ l'on a un nombre $N-1$ de conditions au limite pour N constantes à déterminer. Ainsi, on ne pourra (dans le cas général) avoir une information que sur des rapports de constante. C'est de cette manière que l'on déduit les coefficients R et T . Ceci est une conséquence directe du fait que l'on considère des ondes planes (k fixé $\Rightarrow$ complètement délocalisée), qui ne sont pas des états normalisables.

La normalisation viendra de l'utilisation d'un paquet d'onde, qui sera constitué d'une somme de ces solutions.

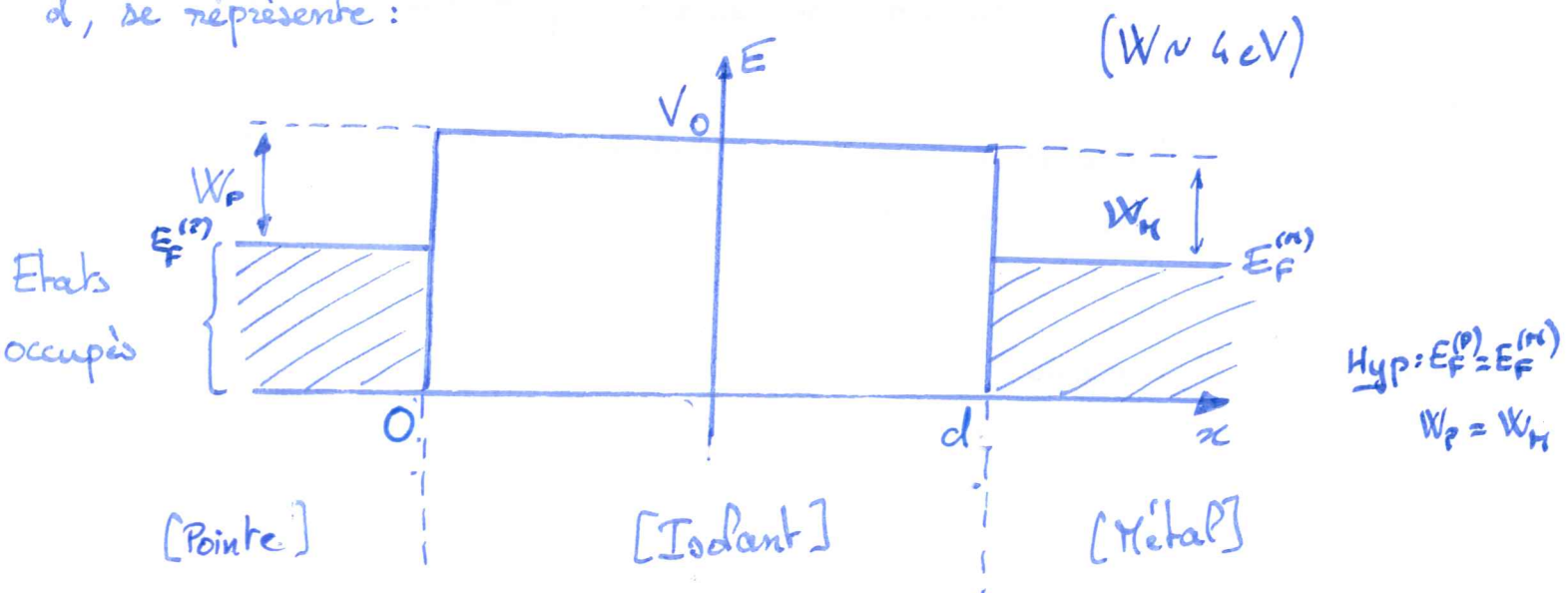
Nous venons d'étudier un modèle simplifié de transition au travers d'une barrière tunnel. En réalité, dans un métal, les électrons sont libres de se propager mais uniquement dans la bande de conduction.

3) Electron dans un métal [1]

À $T=0K$, tous les électrons de la bande de conduction ont une énergie $< E_F$, l'énergie de Fermi (de sorte que tous les états d'énergie $> E_F$ sont vacants).

- On note W , la hauteur de la barrière de potentiel constituant l'énergie qu'il faut fournir pour extraire un électron du métal, et que l'on nomme travail de sortie (eV).

Ainsi, une jonction constituée de 2 électrodes métalliques séparées d'une distance d , se représente :



→ Si la barrière est épaisse, i.e. dont la largeur est telle que $d \gg 1/K$, on peut montrer que l'on peut approximer $[*]$ par :

$$T \approx \frac{16E(E-V_0)}{V_0^2} e^{-2Kd}, \quad [**]$$

⇒ T est indépendant de E et décroît exponentiellement avec la largeur d .

En réécrivant cette relation en faisant apparaître les grandeurs associées au problème on obtient le facteur de transmission en intensité :

$$T(d) \approx T(0) \exp\left[-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m_e^* W} \cdot d\right]$$

m_e^* : masse effective de l'électron dans le cristal.

Hyp : $m \approx m^*$

nb : En pratique, si l'on approche la pointe de la surface à une distance $d \sim 1/K$, alors les électrons peuvent passer de la pointe au matériau par effet tunnel. Le courant qui en résulte est proportionnel au coefficient de transmission d'un électron au travers de la barrière, et est donc très sensible à la distance d .

→ L'intensité du courant tunnel en fonction de la vitesse à l'énergie de Fermi $v_F = \sqrt{2m E_F}$ et de S , la section de traversée est alors :

$$I = J_e \cdot S(-ex) = e v_F T(d) \cdot S \cdot \exp\left[-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m_e W} \cdot d\right] \quad \left(\text{VNA pour } V \right)$$

e : charge de l'électron

- Le déplacement de la pointe le long du matériau, tout en essayant de garder le courant constant, implique la nécessité de faire varier la distance d (pour $V = \text{cte}$).

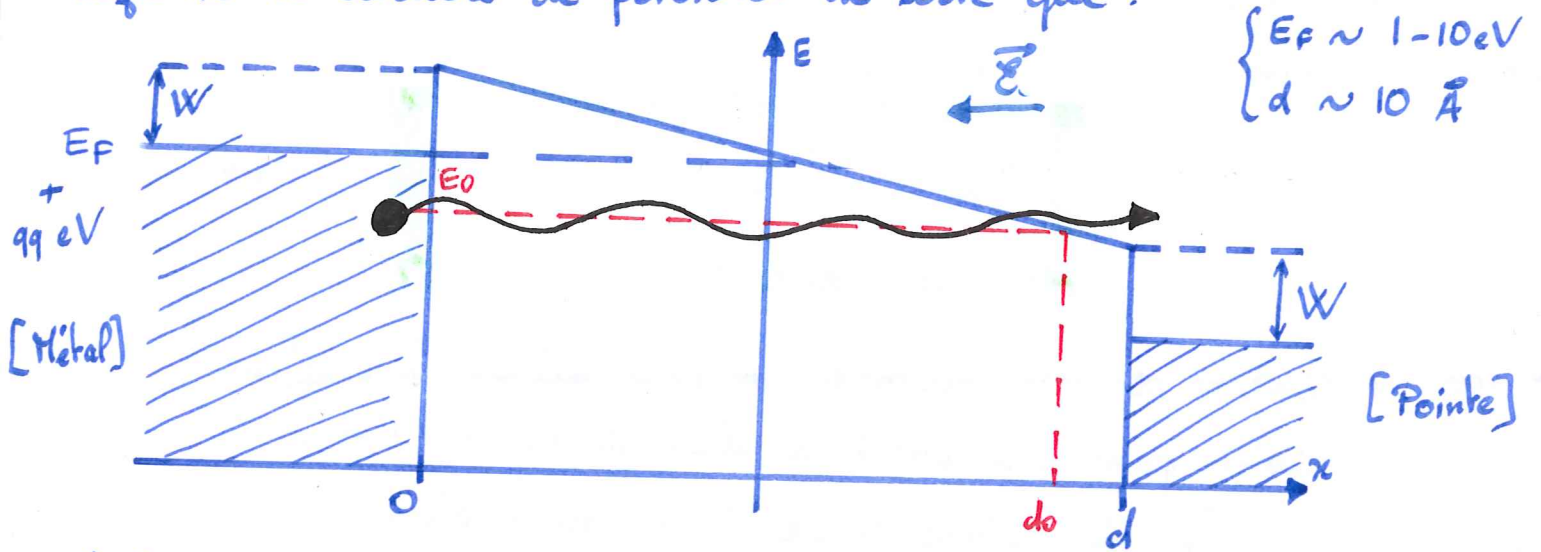
Un dispositif de rétroaction permet de contrôler précisément cette distance au travers de l'asservissement en tension d'un cristal piézoélectrique.

La tension appliquée au piezo est relevée au cours du déplacement et permet de cartographier à l'échelle atomique le paysage électronique d'un métal (d'un conducteur).

4) Mise en pratique [4] [6]

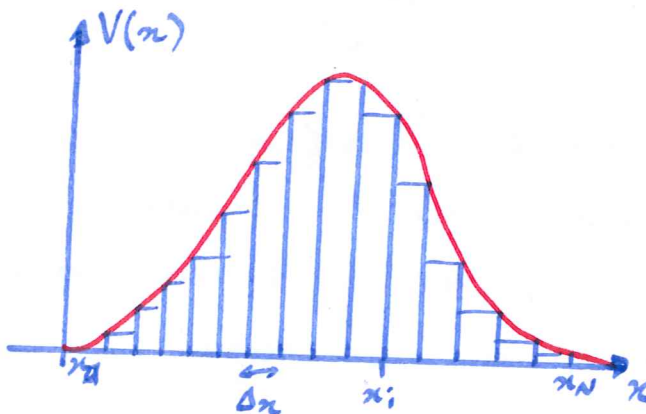
(4)

Lorsque l'on polarise la jonction en appliquant une tension V , on déforme la barrière de potentiel de sorte que :



Le travail d'extraction ne dépend pas de la tension appliquée. Dans ce cas un électron d'énergie $E_0 < E_F$, traverse une barrière tunnel de largeur $d_0 < d$, en présence d'un champ électrique $\vec{E}$.

→ La méthode de calcul du coefficient de transmission utilisée précédemment peut se généraliser à une barrière quelconque. Le principe repose sur le fait que l'on peut approximer tout potentiel par une somme de barrières tunnels cossées de largeur Δx .



On considère une particule incidente de la gauche vers la droite, sous l'hypothèse que les multiples barrières tunnels ne provoquent pas de réflexions multiples entre deux barrières adjacentes.

→ En reprenant le résultat précédent (Eq. [**]), on peut écrire que la transmission d'une barrière située dans l'intervalle $[x_i, x_i + \Delta x]$ est : $T(x_i) \approx \exp(-2 K(x_i) \Delta x)$, avec $K(x_i) = \sqrt{2m(V(x_i) - E)}/\hbar$.

La transmission totale est alors : $T = \prod_{i=1}^N T(x_i)$
 $\approx \exp\left(-2 \Delta x \sum_{i=1}^N K(x_i)\right)$

Dans la limite $\Delta x \rightarrow 0$, la somme discrète devient une somme continue (dans le sens de Riemann), et on a :

$$T \approx \exp\left(-2 \int_{x_1}^{x_N} K(x) dx\right) \quad [***]$$

→ Par utilisation de cette méthode, on peut réécrire le coefficient de transmission pour une particule d'énergie E_0 au travers de la jonction polarisée. Dans ce cas, le potentiel s'écrit :

$$U(x) = E_F + W - e \mathcal{E} x$$

et on a : $d_0 = (E_F + W - E_0) / e \mathcal{E}$.

Ainsi comme le vecteur d'onde dans la barrière est : $K(x) = \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \sqrt{V(x) - E}$, alors d'après l'équation [***] :

$$T(E; d) = \exp\left(-\frac{2 \sqrt{2m}}{\hbar} \int_0^{d_0} \sqrt{E_F + W - E - e \mathcal{E} x} dx\right)$$

$$= \exp\left(-\frac{4}{3} \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \frac{(E_F + W - E)^{3/2}}{e \mathcal{E}}\right)$$

On trouve ici une formule obtenue pour le coefficient de transmission obtenu par Fowler et Nordheim dans le cadre de l'émission de champ. C'est ce type d'émission froide (par opposition avec l'émission thermoelectrique) qui est mise en pratique dans certains tube cathodiques.

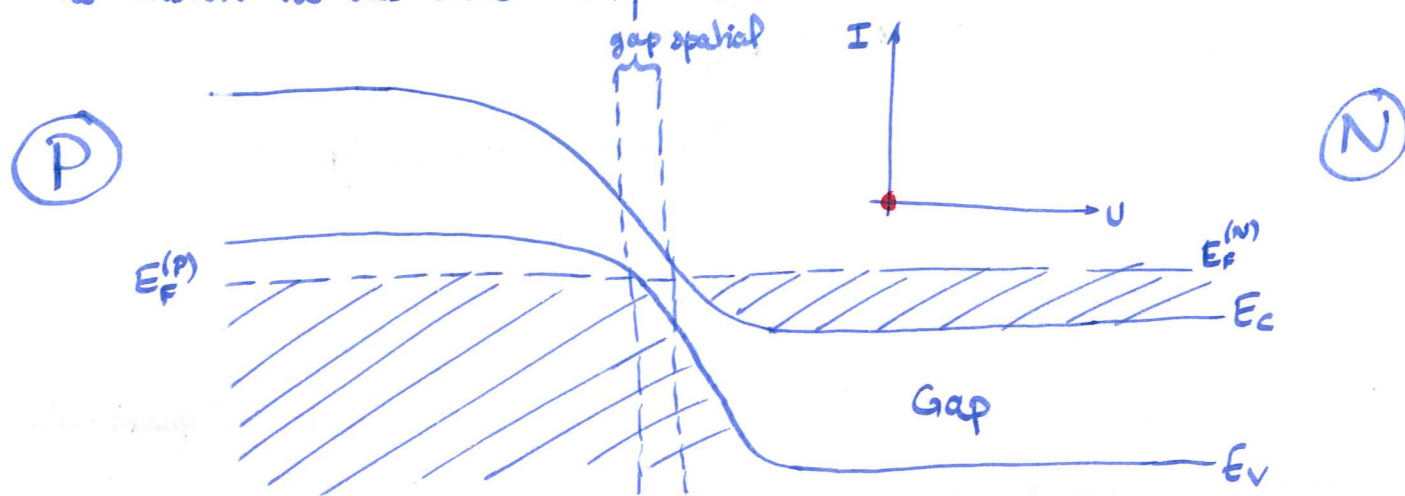
⇒ Plus le champ appliqué sera grand plus la barrière à franchir sera petite (10^7 V/cm pour émission cathodique).

Le microscope à effet tunnel n'est pas la seule application technologique de l'effet tunnel. Notamment grâce aux travaux de Esaki, il s'est développé dans les années 50 les diodes tunnel, utilisées dans le traitement des signaux de haute fréquence (Prix Nobel 1973).

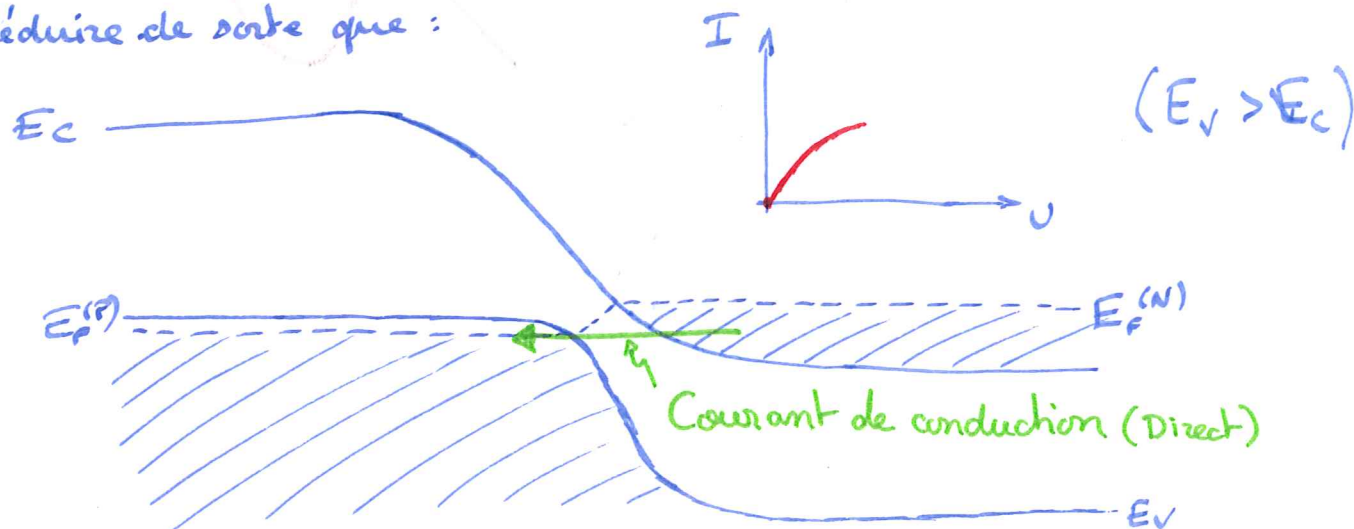
II) Diodes tunnel [5]

D Diode Esaki

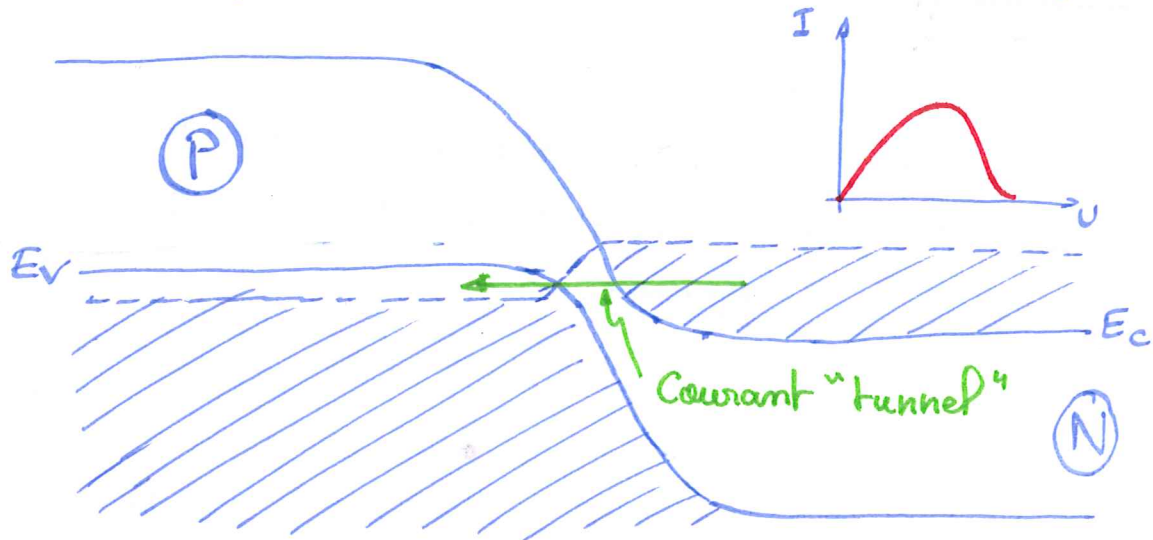
Une diode tunnel est composée d'un autre type de jonction, qui est une jonction entre un semi-conducteur dopé P et un S.C. dopé N. En l'absence de tension la distribution spatiale des bandes prend la forme :



Lorsque l'on va appliquer une différence de potentiel entre les deux électrodes, sous l'effet du champ les bandes vont se déplacer relativement à l'énergie de Fermi (dont la position ne dépend que de la distribution de Fermi-Dirac du gaz d'électron que l'on suppose à $T=0$ ici.). Lorsque la jonction est polarisée en direct, l'écart entre le minimum de la bande de valence et le maximum de la bande de conduction va se réduire de sorte que :



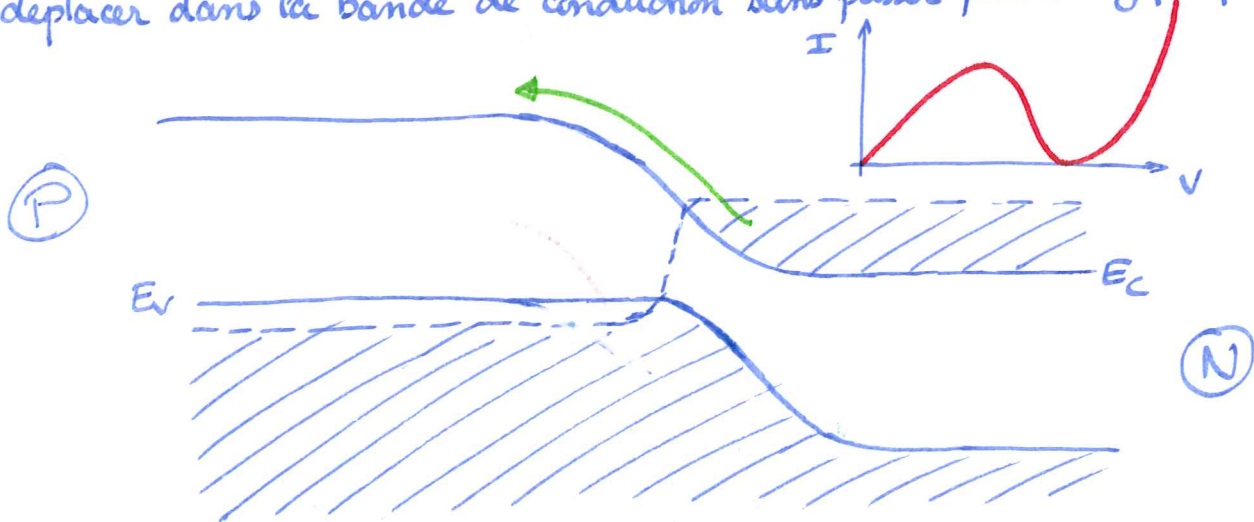
Lorsque l'on soumet le dipôle à une tension suffisamment grande, le niveau de Fermi du S.C. dopé P se retrouve à une énergie inférieure au minimum de la bande de conduction du S.C. dopé N. Tant que $E_v > E_c$, des électrons ont une probabilité non nulle de passer de la bande de conduction (côté N) à la bande de valence (côté P) par effet tunnel.



Une fois que la tension est telle que $E_c = E_v$, aucun état n'est accessible aux électrons de valence et le courant au travers de la diode est quasi-nul.

Il est intéressant de noter que dans cette zone tunnel la pente de la caractéristique est négative, autrement dit la diode se comporte comme une résistance $R = dV/dI < 0$!

Enfin, si l'on augmente un peu plus la tension aux bornes de la diode, l'écart entre l'énergie inférieure de la bande de conduction dans le S.C. dopé P et celle du S.C. dopé N va se réduire de sorte qu'une partie des électrons pourront se déplacer dans la bande de conduction sans passer par un gap spatial.



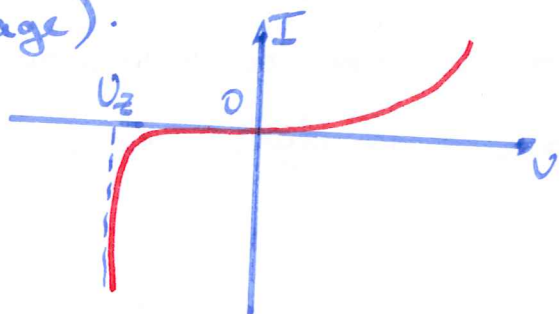
2) Diode Zener

6

Un autre type de composant électronique pour lequel l'effet tunnel joue un rôle central est la diode Zener. Cette jonction P-N a la particularité d'avoir un gap spatial de largeur faible.

L'effet Zener prédit en 1934 consiste au franchissement d'électrons se situant dans la bande de valence du semi-conducteur dopé P au travers de cette barrière de potentiel, de manière à rejoindre par effet tunnel la bande de conduction du semi-conducteur dopé N. Ce franchissement peut se faire lorsque la jonction est fortement polarisée en inverse (champ électrique $\sim 10^9 \text{ V.m}^{-1}$).

Dans ce régime, les porteurs de charge ont une énergie suffisante pour effectuer des collisions inélastiques. Celle-ci sont à l'origine de la création de paires électron-trou participant à la conduction et augmentant de manière significative le courant (tunnel) : c'est l'effet d'avalanche (phénomène de claquage).



Au-delà d'une certaine tension de claquage V_Z , le diode se comporte comme une résistance très faible.

Les diodes Zener sont généralement utilisées comme stabilisateur de tension aux bornes d'un résistor.

Conclusion

• Nous avons vu au travers d'exemples concrets de quelle manière se manifeste l'effet tunnel dans des systèmes idéaux et d'application électronique. Ce phénomène n'est pas le seul mettant en exergue le caractère ondulatoire de la matière. Par exemple, lors de la diffusion d'ondes de matière sur un puits de potentiel, on peut observer une réflexion totale de la particule tant bien même que classiquement elle serait transmise. Cette réflexion quantique provient de l'interférence destructive ayant lieu pour certaines valeurs d'énergie et de largeur de puits.

- Le développement ces dernières décennies du domaine de recherche des atomes ultra-froids permet aujourd'hui de réaliser des condensats de Bose-Einstein : des nuages composés d'atomes cohérents entre eux, pouvant être décrit par une unique fonction d'onde. Ces gaz d'atomes présentent un caractère ondulatoire à l'échelle macroscopique permettant de tester de nombreux modèles issus de la physique de la matière condensée où l'effet tunnel joue un rôle central (transition superfluide-isolant de Hott, excitations de Bloch, etc.).
- Dans toute cette leçon nous nous sommes concentré sur l'étude de l'effet tunnel dans l'espace des positions, mais il est aussi possible de considérer ce phénomène dans l'espace réciproque, des impulsions. En effet, sous l'action d'une force, une particule peut être amenée à changer de bande d'énergie comme nous l'avons vu plus haut.

Nous verrons en physique du solide que ces transitions, dites de Landau-Zener peuvent être interprétées comme le passage non adiabatique d'une bande à une autre au cours de la dynamique.

* Bibliographie :

- [1] Pérez, Quantique, fondement et applications
- [2] Cohen-Tannoudji, Mécanique Quantique
- [3] Cohen-Tannoudji, BUP 499
- [4] Le Bellac, Physique Quantique
- [5] Ngô², Physique des semi-conducteurs
- [6] Mathieu, Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques

Questions et commentaires:

