LYCÉE D'EXCELLENCE
MOHAMMED VI
LEM6 - CASABLANCA

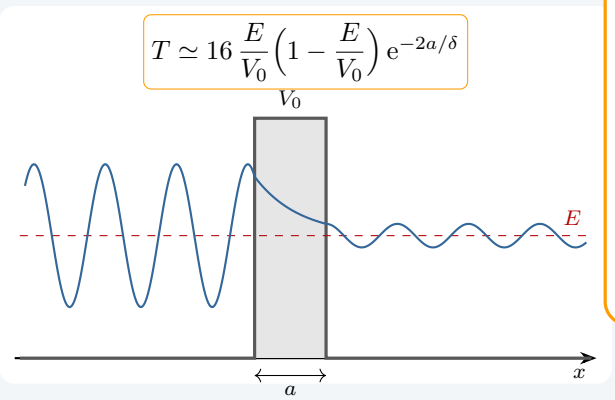
Classes préparatoires aux grandes écoles
MP — Physique-chimie
Année 2026-2027

Q3

PHYSIQUE QUANTIQUE

États stationnaires dans des potentiels constants par morceaux

Marche de potentiel — Coefficients de réflexion et de transmission — Onde évanescente — Barrière et effet tunnel — Puits infini et quantification — Énergie de confinement



« *Les choses à très petite échelle ne se comportent comme rien de ce dont vous avez une expérience directe. Elles ne se comportent pas comme des ondes, elles ne se comportent pas comme des particules.*

— Richard Feynman, *The Feynman Lectures on Physics*, vol. III, chap. 1 (1965)

physionova
physionova.academy

Pr. CHARIFI
professeurcharifi@gmail.com

Simulation associée sur **PhysioNova**
« Puits de potentiel »

Q3 — Potentiels par morceaux

Ce qu'il faut savoir faire à la fin du chapitre

- Citer des exemples physiques de marches, barrières et puits ; écrire les solutions stationnaires dans chaque région et les raccorder (continuité admise).
- Établir la solution pour une marche ; calculer R et T à l'aide des courants de probabilité ; comparer au comportement classique.
- Reconnaître et caractériser une onde évanescente (profondeur de pénétration).
- Décrire l'influence de la hauteur et de la largeur d'une barrière sur la transmission ; expliquer la radioactivité α et le microscope à effet tunnel avec la formule fournie.
- Établir les niveaux d'énergie du puits infini ; faire l'analogie avec la corde vibrante.
- Estimer une énergie de confinement, y compris pour un puits non rectangulaire, en lien avec l'inégalité de Heisenberg.

Comment lire ce cours

Les résultats sont repérés par des étiquettes : R à connaître par cœur ; D démonstration à savoir refaire ; M méthode à maîtriser. On utilise les états stationnaires (Q1) et la description d'un faisceau par une onde plane avec son courant de probabilité (Q2). La formule de transmission d'une barrière est fournie. La simulation PhysioNova « Puits de potentiel » permet de faire varier la profondeur et la largeur d'un puits et d'observer niveaux d'énergie et fonctions d'onde.
Des **exercices d'application corrigés** sont placés juste après les notions qu'ils illustrent ; les exercices d'approfondissement et les classiques des concours, également corrigés, terminent le chapitre.

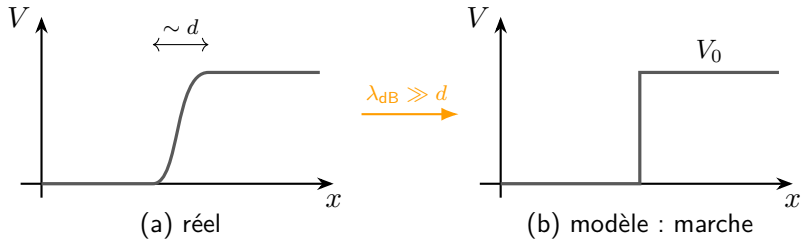
Table des matières

I Potentiels constants par morceaux . . . 3
I.1 Pourquoi des marches, des barrières et des puits ? . . . 3
I.2 Comportement classique . . . 3
I.3 Méthode générale de résolution . . . 3
II Marche de potentiel : cas $E > V_0$ . . . 4
II.1 États stationnaires . . . 4
II.2 Coefficients de réflexion et de transmission . . . 4
III Marche de potentiel : cas $E < V_0$, onde évanescente . . . 6
III.1 Solution . . . 6
IV Barrière de potentiel et effet tunnel . . . 8
IV.1 Franchir une barrière classiquement infranchissable . . . 8
IV.2 Applications . . . 9
V Puits de potentiel infini . . . 10
V.1 Niveaux d'énergie et fonctions d'onde . . . 10
VI Énergie de confinement . . . 12
VI.1 Lien avec l'inégalité de Heisenberg . . . 12
VI.2 Puits non rectangulaire . . . 13
VII Synthèse . . . 14
VIII Exercices d'approfondissement . . . 14
IX Classiques des concours . . . 15

I Potentiels constants par morceaux

I.1 Pourquoi des marches, des barrières et des puits ?

Un électron de conduction se déplace librement dans un métal, mais il n'en sort pas spontanément : à la surface, l'attraction des ions du réseau crée une brusque augmentation de son énergie potentielle, de l'ordre du travail de sortie (quelques eV), sur une distance de l'ordre de la distance interatomique d. Lorsque la longueur d'onde de de Broglie de la particule est grande devant d, la particule « ne voit pas » le détail de la variation et l'on peut la modéliser par une discontinuité.



(a) réel (b) modèle : marche

Fig. 1 : Modélisation d'une variation brusque d'énergie potentielle par une marche.

Profil	Exemples physiques
Marche	électron de conduction à la surface d'un métal ; neutron entrant dans un noyau (marche descendante, $V_0 \simeq -40\,\mathrm{MeV}$) ; électron franchissant une hétérojonction entre deux semi-conducteurs
Barrière	couche d'oxyde isolante entre deux métaux (jonction tunnel) ; vide entre la pointe et l'échantillon d'un microscope à effet tunnel ; barrière coulombienne d'un noyau radioactif α
Puits	électron dans une molécule conjuguée ou une boîte quantique ; nucléon dans un noyau ; électrons de conduction dans un métal

I.2 Comportement classique

Une particule classique d'énergie E, venant de $-\infty$, aborde une marche de hauteur $V_0 > 0$ (sans frottement) :

- si $E < V_0$, elle s'arrête au pied de la marche et fait demi-tour : sa vitesse passe de $v_1 = \sqrt{2E/m}$ à $-v_1$; elle n'est jamais présente en $x > 0$;
- si $E > V_0$, elle franchit toujours la marche et poursuit avec la vitesse réduite $v_2 = \sqrt{2(E-V_0)/m}$: elle n'est jamais réfléchie.

✗ Attention, erreurs fréquentes

La vitesse s'obtient par conservation de l'énergie, $\frac{1}{2}mv^2 = E - V$, soit $v = \sqrt{2(E-V)/m}$; l'expression $\sqrt{(E-V)/(2m)}$ que l'on rencontre parfois est fausse (elle vaut la moitié de la bonne valeur).

I.3 Méthode générale de résolution

☞ Méthode — États stationnaires dans un potentiel constant par morceaux M

On cherche $\Psi(x,t) = \varphi(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Et/\hbar}$, où $\varphi'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E-V)\varphi = 0$.

1. **Dans chaque région** où $V = V_j$ est constant :

- si $E > V_j$: $\varphi_j = A_j e^{ik_j x} + B_j e^{-ik_j x}$ avec $k_j = \dfrac{\sqrt{2m(E-V_j)}}{\hbar}$ (ondes progressives dans les deux sens) ;
- si $E < V_j$: $\varphi_j = C_j e^{q_j x} + D_j e^{-q_j x}$ avec $q_j = \dfrac{\sqrt{2m(V_j-E)}}{\hbar}$ (exponentielles réelles).

2. **Conditions physiques** : éliminer les exponentielles qui divergent dans une région infinie ; éliminer l'onde venant de $+\infty$ si aucune source n'y envoie de particules.
3. **Raccordements (admis)** : φ et φ' continues en chaque discontinuité finie de V ; $\varphi = 0$ au bord d'une région où $V = +\infty$.
4. **Exploitation** : coefficients de réflexion et de transmission par les courants $J = |A|^2\hbar k/m$ (états de diffusion) ou quantification de E (états liés).

II Marche de potentiel : cas $E > V_0$

II.1 États stationnaires

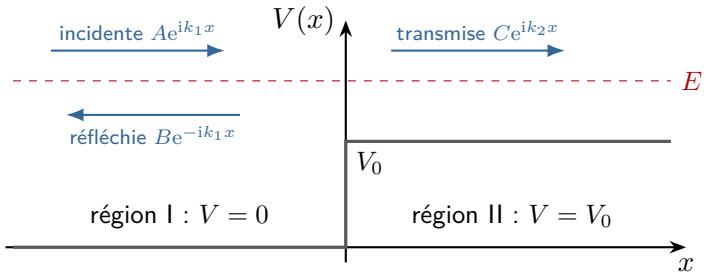


Fig. 2 : Marche de potentiel : $V = 0$ pour $x < 0$, $V = V_0 > 0$ pour $x > 0$; la particule arrive de $-\infty$.

Coefficients en amplitude D

Dans les deux régions, $E > V$: on pose $k_1 = \dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ et $k_2 = \dfrac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar} < k_1$. Aucune particule ne venant de $+\infty$:

$$\varphi_{\mathrm{I}}(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}, \qquad \varphi_{\mathrm{II}}(x) = Ce^{ik_2x}.$$

La continuité de φ et de φ' en $x = 0$ donne $A + B = C$ et $k_1(A - B) = k_2 C$. Avec $r = B/A$ et $t = C/A$:

$$1 + r = t, \quad 1 - r = \frac{k_2}{k_1}t \qquad \Longrightarrow \qquad r = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}, \qquad t = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}.$$

II.2 Coefficients de réflexion et de transmission

Définition — Coefficients R et T R

Le faisceau incident est décrit par l'onde Ae^{ik_1x}. Les coefficients de réflexion et de transmission sont

les rapports des **courants de probabilité** (Q2) :

$$R = \frac{|J_r|}{|J_i|}, \qquad T = \frac{|J_t|}{|J_i|}, \qquad J_i = |A|^2 \frac{\hbar k_1}{m}, \quad J_r = -|B|^2 \frac{\hbar k_1}{m}, \quad J_t = |C|^2 \frac{\hbar k_2}{m}.$$

R est la probabilité qu'une particule incidente soit réfléchie, T celle qu'elle soit transmise ; pour un faisceau, ce sont les fractions de particules réfléchies et transmises.

Réflexion et transmission par une marche ($E > V_0$) R D

$$R = |r|^2 = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2 = \left(\frac{1 - \sqrt{1 - V_0/E}}{1 + \sqrt{1 - V_0/E}}\right)^2, \qquad T = \frac{k_2}{k_1}|t|^2 = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}, \qquad R + T = 1.$$

En effet $R + T = \dfrac{(k_1 - k_2)^2 + 4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2} = 1$: c'est la **conservation de la probabilité** (le courant est uniforme en régime stationnaire, $J_i + J_r = J_t$) ; aucune particule ne disparaît.

✗ Attention, erreurs fréquentes

- $T \neq |t|^2$: les particules transmises n'ont pas la même vitesse que les particules incidentes, et le courant fait intervenir k. On peut d'ailleurs avoir $|t| > 1$ (ici $t > 1$) sans violer quoi que ce soit : seule la conservation du courant compte.
- $r + t \neq 1$ en général ; c'est $R + T = 1$ qui traduit la conservation.

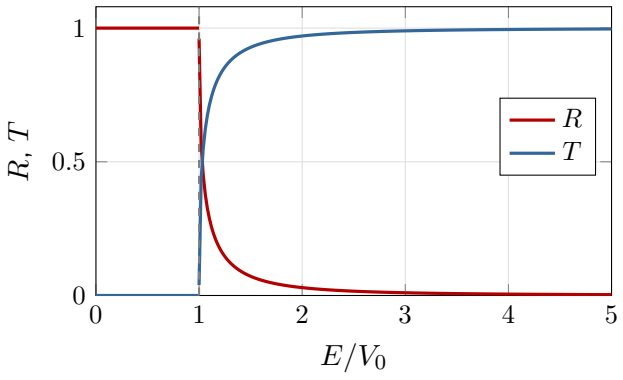


Fig. 3 : Coefficients de réflexion et de transmission d'une marche en fonction de E/V_0. Classiquement : $R = 1$ pour $E < V_0$ et $R = 0$ pour $E > V_0$.

Différences avec le comportement classique R

- Pour $E > V_0$, la particule quantique a une probabilité **non nulle d'être réfléchie**, effet sans équivalent classique. C'est l'analogue de la réflexion partielle de la lumière à un changement d'indice.
- R n'est notable qu'au voisinage du seuil ($E \to V_0^+$, $k_2 \to 0$, $R \to 1$) ; il tend vers 0 si $E \gg V_0$: la marche devient négligeable et l'on retrouve le comportement classique.
- La formule est symétrique en k_1 et k_2 : une **marche descendante** ($V_0 < 0$) réfléchit aussi, avec le même R que la marche montante correspondante. Une bille classique ne rebondit jamais au bord d'une falaise !

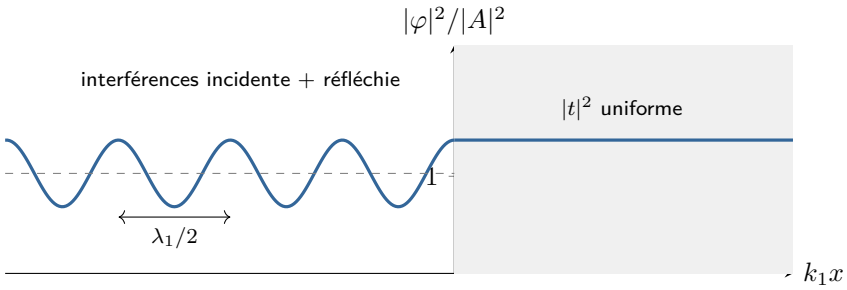


Fig. 4 : Densité de probabilité pour $E = 2V_0$ ($R = 2{,}9\,\%$). Dans la région I, l'interférence des ondes incidente et réfléchie donne $|\varphi_{\mathrm{I}}|^2 = |A|^2\left[1 + R + 2\sqrt{R}\cos(2k_1x)\right]$, de période $\lambda_1/2$; la particule n'est confinée nulle part : c'est un **état de diffusion**.

☞ Exercices d'application

EXERCICE 1 **Réflexion au-dessus de la marche** ✦✧✧✧✧

Q-1) Calculer R et T pour $E = \frac{4}{3}V_0$, puis pour $E = 1{,}1\,V_0$. Commenter.

Q-2) Exprimer $|t|^2$ pour $E = \frac{4}{3}V_0$ et vérifier qu'il diffère de T.

EXERCICE 2 **Un neutron lent sur un noyau** ✦✦✧✧✧

Un neutron d'énergie cinétique $E = 1{,}0\,\mathrm{MeV}$ arrive sur un noyau. On modélise l'interaction nucléaire par une marche descendante : $V = 0$ à l'extérieur, $V = -40\,\mathrm{MeV}$ à l'intérieur.

Q-1) Exprimer k_2/k_1 et calculer la probabilité de réflexion. Que prévoit la mécanique classique ?

Q-2) Comment évolue R pour des neutrons plus lents ? Commenter.

III Marche de potentiel : cas $E < V_0$, onde évanescente

III.1 Solution

Réflexion totale et onde évanescente D

Dans la région II, $E < V_0$: $\varphi_{\mathrm{II}}'' = q^2\varphi_{\mathrm{II}}$ avec $q = \dfrac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$. La solution en e^{qx} diverge en $+\infty$ et doit être éliminée :

$$\varphi_{\mathrm{I}} = A\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} \quad (k = \sqrt{2mE}/\hbar), \qquad \varphi_{\mathrm{II}} = C\mathrm{e}^{-qx}.$$

Les raccordements en 0, $A + B = C$ et $\mathrm{i}k(A - B) = -qC$, donnent

$$r = \frac{B}{A} = \frac{k - \mathrm{i}q}{k + \mathrm{i}q}, \qquad t = \frac{C}{A} = \frac{2k}{k + \mathrm{i}q}, \qquad |r| = 1 \;\Rightarrow\; R = 1, \quad T = 0.$$

Interprétation R

- **Réflexion totale** : $R = 1$ comme en mécanique classique ; l'onde réfléchie est déphasée : $r = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta}$ avec $\tan\theta = \dfrac{2kq}{k^2 - q^2}$, $\theta \in [0, \pi]$. Dans la région I, ondes incidente et réfléchie, de même amplitude, forment une **onde stationnaire** : $|\varphi_{\mathrm{I}}|^2 = 2|A|^2\,[1 + \cos(2kx + \theta)]$.
- **Onde évanescente** : la densité de probabilité n'est pas nulle dans la région II, classiquement

interdite :

$$|\varphi_{\mathrm{II}}(x)|^2 = |A|^2\,\frac{4E}{V_0}\,\mathrm{e}^{-2qx}, \qquad \delta = \frac{1}{q} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0-E)}} \quad \text{(profondeur de pénétration).}$$

La particule pénètre dans la marche sur une distance de l'ordre de δ. L'onde évanescente oscille dans le temps ($\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Et/\hbar}$) mais ne se propage pas : comme φ_{II} est réelle à un facteur près, son courant de probabilité est nul.

- **Limite classique** : $\delta \to 0$ quand $m \to \infty$ ou quand $V_0 - E$ est grand.

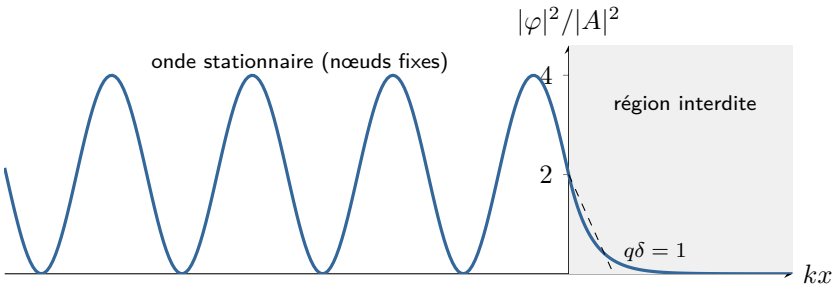


Fig. 5 : Densité de probabilité pour $E = V_0/2$ ($q = k$, $\theta = \pi/2$) : nœuds et ventres fixes dans la région I, décroissance exponentielle sur la distance $\delta/2$ dans la région II.

Remarque

Analogies. La même situation se rencontre en optique (réflexion totale : une onde évanescente existe au-delà du dioptre ; si l'on approche un second prisme, la lumière le traverse : c'est la « réflexion totale frustrée », analogue optique de l'effet tunnel), pour une onde électromagnétique dans un plasma au-dessous de la pulsation plasma, ou dans un conducteur (effet de peau).

Ordres de grandeur

Pour un électron, $\delta = \dfrac{0{,}195\,\mathrm{nm}}{\sqrt{(V_0-E)/1\,\mathrm{eV}}}$: avec $V_0 - E = 1\,\mathrm{eV}$, $\delta = 0{,}20\,\mathrm{nm}$, comparable à une distance interatomique. Pour un proton, δ est $\sqrt{1836} \simeq 43$ fois plus petite : $4{,}6\,\mathrm{pm}$.

☞ Exercices d'application

EXERCICE 3 Électrons au bord d'un métal ✦✦✧✧✧

Les électrons de conduction les plus énergétiques d'un métal doivent recevoir $W = 4{,}5\,\mathrm{eV}$ pour en sortir : on modélise la surface par une marche de hauteur $V_0 = E + W$.

Q-1) Calculer la profondeur de pénétration δ de ces électrons dans le vide. Même question pour un proton qui verrait la même marche.

Q-2) Par quel facteur la densité de probabilité de présence est-elle divisée à $0{,}3\,\mathrm{nm}$ de la surface ? Qu'en conclure pour deux métaux séparés par un intervalle de vide de cet ordre ?

EXERCICE 4 **Déphasage à la réflexion** ✦✦✧✧✧

Q-1) Vérifier que $|r| = 1$ et calculer θ pour $E = V_0/2$, puis pour $E \to 0$ et $E \to V_0^-$.

Q-2) En déduire, dans chaque cas, la position du premier maximum de $|\varphi_{\mathrm{I}}|^2$ devant la marche. Comparer au cas d'un mur infini ($V_0 \to \infty$), où $\varphi(0) = 0$.

IV Barrière de potentiel et effet tunnel

IV.1 Franchir une barrière classiquement infranchissable

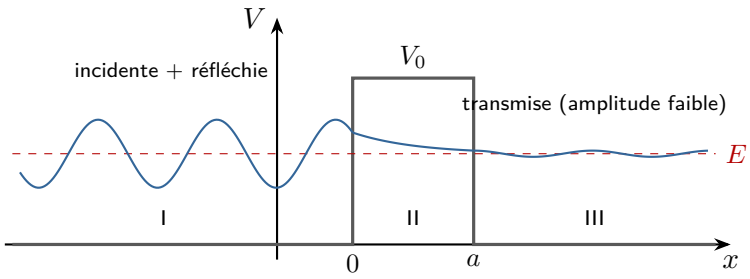


Fig. 6 : Barrière de hauteur V_0 et de largeur a : allure de la partie réelle de φ (tracée à la hauteur de E). L'onde, évanescente dans la barrière, n'y est pas nulle en $x = a$ et se raccorde à une onde transmise.

On considère $V = V_0$ pour $0 < x < a$, $V = 0$ ailleurs, et une particule incidente d'énergie $0 < E < V_0$. Avec $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ et $q = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$:

$$\varphi_{\mathrm{I}} = A_1 \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + B_1 \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}, \qquad \varphi_{\mathrm{II}} = A_2 \mathrm{e}^{qx} + B_2 \mathrm{e}^{-qx}, \qquad \varphi_{\mathrm{III}} = A_3 \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}.$$

Dans la région II, finie, les deux exponentielles sont conservées. Les quatre conditions de continuité (φ et φ' en 0 et en a) déterminent les quatre rapports B_1/A_1, A_2/A_1, B_2/A_1, A_3/A_1. Si la barrière n'est pas trop large, φ n'est pas nulle en $x = a$ et l'onde transmise existe : la particule traverse la barrière avec une probabilité non nulle, bien que son énergie soit inférieure à V_0. C'est l'**effet tunnel**, sans équivalent classique.

Coefficient de transmission (formule fournie, calcul non exigible) R

Comme k est le même dans les régions I et III, $T = |A_3/A_1|^2$ et l'on montre que

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

Pour une **barrière épaisse**, $qa \gg 1$, $\operatorname{sh}(qa) \simeq \frac{1}{2}\mathrm{e}^{qa}$ et

$$T \simeq 16 \frac{E}{V_0}\left(1 - \frac{E}{V_0}\right) \exp\left(-\frac{2a}{\delta}\right), \qquad \delta = \frac{1}{q} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}.$$

Influence des paramètres R

- T décroît **exponentiellement** avec la largeur a : doubler a revient à élever (à peu près) T au carré.
- T décroît quand la **hauteur** $V_0 - E$ « vue » par la particule augmente (δ diminue).
- T décroît quand la **masse** augmente, comme $\exp\left(-2a\sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar\right)$.

L'effet tunnel n'est notable que pour des particules légères et des barrières dont la largeur est de l'ordre de quelques δ, c'est-à-dire, pour des électrons et des hauteurs de quelques eV, de l'ordre du nanomètre.

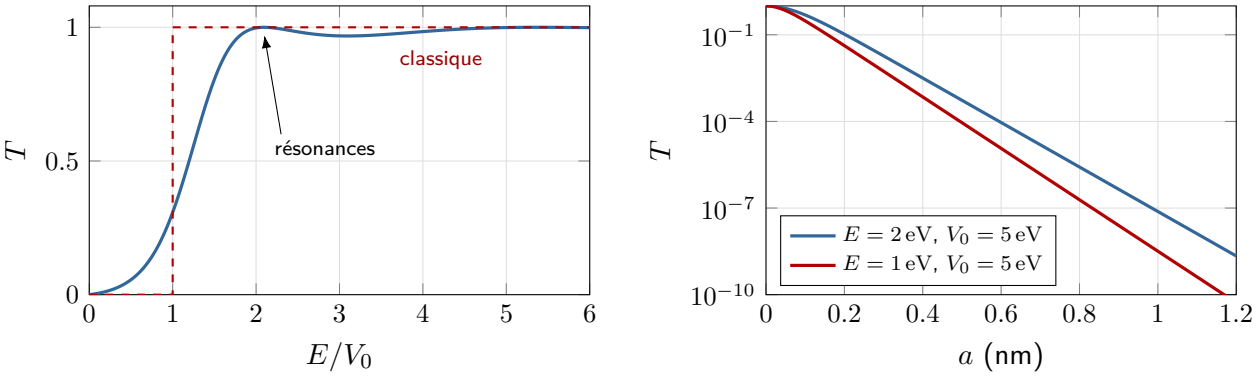


Fig. 7 : À gauche : transmission d'une barrière en fonction de E/V_0 (pour $a\sqrt{2mV_0}/\hbar = 3$) ; pour $E > V_0$, la particule quantique peut être réfléchie, sauf aux résonances où la barrière contient un nombre entier de demi-longueurs d'onde. À droite : décroissance exponentielle de T avec la largeur pour un électron (échelle logarithmique).

Remarque

Pour $E > V_0$ (complément), $T = \left[1 + \dfrac{V_0^2 \sin^2(k_2 a)}{4E(E-V_0)}\right]^{-1}$ avec $k_2 = \sqrt{2m(E-V_0)}/\hbar$: la transmission est totale lorsque $k_2 a = n\pi$, comme pour une lame à faces parallèles en optique (approfondissement °3).

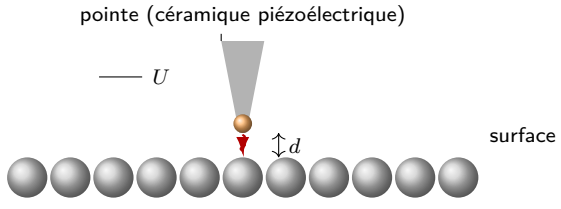
IV.2 Applications

Microscope à effet tunnel (STM, Binnig et Rohrer, 1981) R

Une pointe métallique très fine est approchée à une distance d de quelques dixièmes de nanomètre d'une surface conductrice. Le vide qui les sépare est une barrière de hauteur de l'ordre du travail de sortie W ($\simeq 4$ à $5\,\text{eV}$). Sous une faible tension, un courant tunnel circule :

$$I \propto T \propto \exp\left(-\frac{2d}{\delta}\right), \qquad \delta = \frac{\hbar}{\sqrt{2m_e W}} \simeq 0{,}09\,\text{nm}.$$

Quand d augmente de $0{,}1\,\text{nm}$, I est divisé par un facteur de l'ordre de 10. En balayant la surface et en asservissant d pour garder I constant, on enregistre le relief avec une résolution verticale de l'ordre du picomètre : on « voit » les atomes.



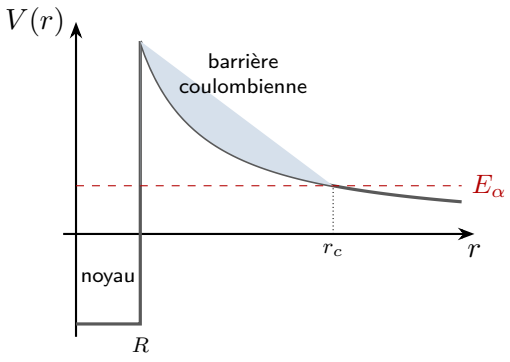


Fig. 8 : À gauche : principe du microscope à effet tunnel. À droite : modèle de Gamow de la radioactivité α ; la particule α, d'énergie E_α, traverse par effet tunnel la région $R < r < r_c$ (en bleu).

Radioactivité α (Gamow, Gurney et Condon, 1928) R

Dans un noyau lourd, une particule α d'énergie E_α de 4 à $9\,\mathrm{MeV}$ est retenue par une barrière coulombienne dont le sommet atteint 25 à $30\,\mathrm{MeV}$. Classiquement, elle ne pourrait jamais sortir. Elle s'échappe par effet tunnel : à chaque « choc » sur la barrière (environ 10^{21} par seconde), elle a la probabilité T de la traverser, et la durée de vie du noyau vaut $\tau \simeq 1/(fT)$. Comme T dépend *exponentiellement* de l'énergie (la barrière est d'autant plus large que E_α est faible), une variation d'un facteur 2 de E_α fait varier les demi-vies de 10^{-7} s à 10^{17} s : c'est la loi empirique de Geiger et Nuttall (concours °2).

Remarque

Autres manifestations : fusion de l'hydrogène dans les étoiles (les protons traversent leur barrière coulombienne mutuelle à des températures de « seulement » $1{,}5 \times 10^7\,\mathrm{K}$) ; inversion de la molécule d'ammoniac (Q4) ; diode tunnel ; mémoires flash, dont les électrons traversent une couche d'oxyde de quelques nanomètres ; jonctions Josephson.

☞ Exercices d'application

EXERCICE 5 **Ordres de grandeur de la transmission** ✦✦✧✧✧

Un électron d'énergie $E = 2{,}0\,\mathrm{eV}$ arrive sur une barrière de hauteur $V_0 = 5{,}0\,\mathrm{eV}$.

Q-1) Calculer δ. Calculer T par la formule approchée pour $a = 0{,}40\,\mathrm{nm}$, puis $a = 0{,}80\,\mathrm{nm}$. L'approximation est-elle justifiée ? (La formule exacte donne $3{,}17 \times 10^{-3}$ et $2{,}62 \times 10^{-6}$.)

Q-2) Reprendre le premier cas pour un proton. Conclure.

EXERCICE 6 **Sensibilité du microscope à effet tunnel** ✦✦✧✧✧

Le travail de sortie du tungstène vaut $W = 4{,}5\,\mathrm{eV}$; on prend $V_0 - E \simeq W$.

Q-1) Par quel facteur le courant tunnel est-il divisé quand la pointe s'éloigne de $0{,}10\,\mathrm{nm}$?

Q-2) L'électronique détecte une variation relative de courant de $1\,\%$. Quelle variation de distance cela représente-t-il ? Comparer au rayon d'un atome.

V Puits de potentiel infini

V.1 Niveaux d'énergie et fonctions d'onde

On considère une particule confinée par $V = 0$ pour $0 < x < L$ et $V = +\infty$ ailleurs. Les régions où V est infini lui sont interdites : $\varphi = 0$ pour $x \leqslant 0$ et $x \geqslant L$.

États stationnaires du puits infini D

Dans le puits, $\varphi'' + k^2\varphi = 0$ avec $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ (on vérifie comme en Q2 que $E \leqslant 0$ ne donne que $\varphi = 0$) :

1. $\varphi(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx)$; la continuité de φ en 0 impose $\varphi(0) = B = 0$;
2. la continuité en L impose $A\sin(kL) = 0$ avec $A \neq 0$, donc $kL = n\pi$, $n \in \mathbb{N}^*$ ($n = 0$ donnerait $\varphi = 0$, et $n < 0$ redonne les mêmes états au signe près) ;

3. la normalisation $\int_0^L A^2 \sin^2(n\pi x/L)\mathrm{d}x = A^2 L/2 = 1$ donne $A = \sqrt{2/L}$.
Avec $k_n = n\pi/L$ et $E_n = \hbar^2 k_n^2/(2m)$:

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\,\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right), \qquad E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2} = n^2\,\frac{h^2}{8mL^2} = n^2 E_1, \qquad n \in \mathbb{N}^*.$$

Les états stationnaires complets sont $\Psi_n(x,t) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n t/\hbar}$. La dérivée φ_n' est discontinue en 0 et L, ce qui est permis puisque V y est infini.

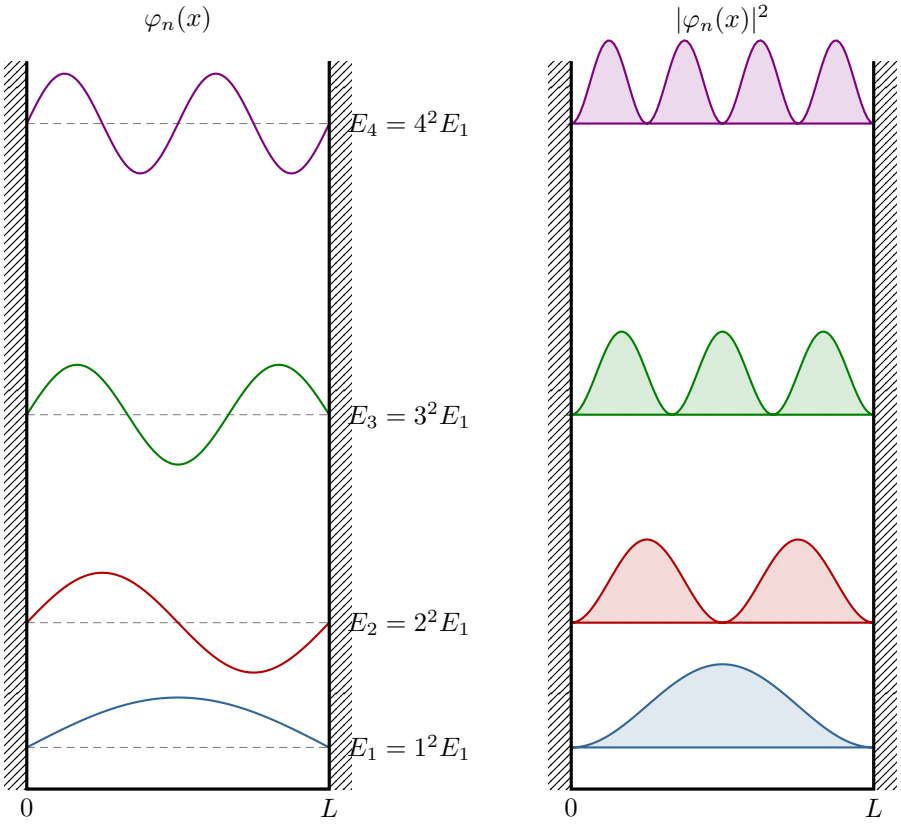


Fig. 9 : Quatre premiers niveaux du puits infini ; chaque fonction est tracée à la hauteur de son niveau (échelle verticale des énergies respectée). L'état n possède $n-1$ nœuds intérieurs, où la particule n'est jamais détectée.

Quantification et analogie avec la corde vibrante R

- L'énergie est **quantifiée** : ce sont les **conditions aux limites** qui sélectionnent les valeurs permises, exactement comme pour les modes propres d'une corde vibrante fixée en ses deux extrémités : $L = n\dfrac{\lambda_n}{2}$. Chaque partie spatiale φ_n a la forme d'un mode propre, avec $n-1$ nœuds intérieurs.
- Différence essentielle : pour la corde, la fréquence $\nu_n = nc/(2L)$ est proportionnelle à n (dispersion linéaire) ; pour la particule, $E_n = h\nu_n \propto n^2$ (relation de dispersion quadratique $\omega = \hbar k^2/2m$).
- Le niveau $n = 1$ est l'**état fondamental**, les autres sont les **états excités**. Une transition $n \to n'$ s'accompagne de l'émission ou de l'absorption d'un photon d'énergie $|E_n - E_{n'}|$.

Remarque

Limite classique. Une particule classique confinée peut avoir n'importe quelle énergie, y compris nulle, et parcourt le puits à vitesse constante : sa densité de présence est uniforme, $1/L$. Quantiquement, l'écart relatif entre niveaux voisins, $\frac{E_{n+1}-E_n}{E_n} = \frac{2n+1}{n^2} \simeq \frac{2}{n}$, tend vers 0 pour n grand : le spectre paraît continu ; et $|\varphi_n|^2 = \frac{2}{L}\sin^2(n\pi x/L)$ oscille si vite que sa moyenne locale vaut $1/L$: on retrouve la densité classique (principe de correspondance).

Ordres de grandeur

Système	Taille L	$E_1 = h^2/(8mL^2)$
électron dans une molécule conjuguée	$1\,\mathrm{nm}$	$0{,}38\,\mathrm{eV}$ (transitions dans le visible ou le proche IR)
électron dans une boîte quantique	2 à $10\,\mathrm{nm}$	$4\,\mathrm{meV}$ à $0{,}1\,\mathrm{eV}$ (couleur réglée par la taille)
nucléon dans un noyau	$10\,\mathrm{fm}$	$2\,\mathrm{MeV}$ (énergies nucléaires)
électron dans une boîte de $1\,\mathrm{cm}$	$1\,\mathrm{cm}$	$4\times10^{-15}\,\mathrm{eV}$ (spectre quasi continu)

☞ Exercices d'application

EXERCICE 7 Un colorant modélisé par un puits

Un électron délocalisé sur une chaîne moléculaire est modélisé par une particule dans un puits infini de largeur $L = 0{,}80\,\mathrm{nm}$.

Q-1) Calculer E_1 en eV et la longueur d'onde du photon absorbé lors de la transition $1 \to 2$.

Q-2) Comment varie cette longueur d'onde si l'on allonge la chaîne ?

EXERCICE 8 Boîtes quantiques et nucléons

Q-1) On réduit de $25\,\%$ la taille d'une boîte quantique. Par quel facteur est multipliée la longueur d'onde de sa transition fondamentale ? Les petites boîtes émettent-elles vers le bleu ou vers le rouge ?

Q-2) Estimer E_1 pour un neutron ($m_n = 1{,}675\times10^{-27}\,\mathrm{kg}$) confiné sur $L = 5\,\mathrm{fm}$ et comparer aux énergies atomiques.

VI Énergie de confinement

VI.1 Lien avec l'inégalité de Heisenberg

Énergie de confinement R

L'état fondamental du puits infini a une énergie $E_1 = \dfrac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2} > 0$: une particule confinée n'est jamais au repos. Cette énergie minimale, purement cinétique, est l'**énergie de confinement** :

$$E_{\text{conf}} \sim \frac{\hbar^2}{mL^2}.$$

Interprétation : confinée sur L, la particule a $\Delta x \lesssim L$, donc $\Delta p_x \gtrsim \hbar/L$ (Heisenberg) et une énergie cinétique moyenne $\langle p_x^2\rangle/2m \gtrsim \hbar^2/(2mL^2)$. Elle est d'autant plus grande que la particule est légère et que le confinement est fort.

VI.2 Puits non rectangulaire

☞ Méthode — Estimer l'énergie du fondamental d'un puits quelconque M

Pour un potentiel $V(x)$ de minimum $V(0) = 0$:

1. on caractérise l'extension du fondamental par une longueur ℓ ($\Delta x \sim \ell$) ;
2. on évalue l'énergie cinétique par Heisenberg, $E_c \sim \dfrac{\hbar^2}{2m\ell^2}$, et l'énergie potentielle par $V(\ell)$;
3. on minimise $E(\ell) = \dfrac{\hbar^2}{2m\ell^2} + V(\ell)$: l'énergie de confinement, décroissante, s'oppose à l'énergie potentielle, croissante. La valeur minimale donne l'ordre de grandeur de l'énergie du fondamental, et ℓ celui de sa taille.

Le résultat n'est fiable qu'à un facteur numérique près (de l'ordre de 2).

Exemple : l'oscillateur harmonique M

Pour $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$: $E(\ell) = \dfrac{\hbar^2}{2m\ell^2} + \dfrac{1}{2}m\omega^2\ell^2$ est minimale pour $\ell^2 = \dfrac{\hbar}{m\omega}$, d'où $E_{\min} \sim \hbar\omega$. La résolution exacte de l'équation de Schrödinger (Q1, approfondissement °2) donne un état fondamental gaussien d'extension $\sigma = \sqrt{\hbar/(m\omega)}$ et d'énergie $\frac{1}{2}\hbar\omega$, et des niveaux équidistants

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \qquad n \in \mathbb{N}.$$

L'estimation donne la bonne dépendance en $\hbar\omega$ et la bonne taille, avec un facteur 2 sur l'énergie. L'**énergie de point zéro** $\frac{1}{2}\hbar\omega$ se manifeste par exemple dans les vibrations moléculaires et dans la non-solidification de l'hélium sous pression atmosphérique.

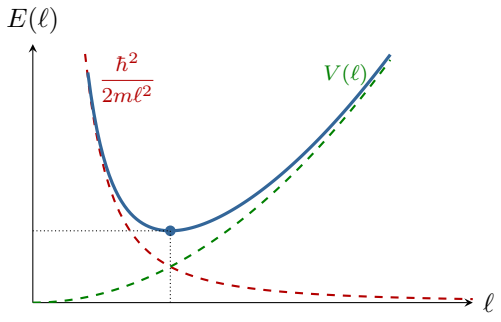


Fig. 10 : Compétition entre énergie de confinement et énergie potentielle : le minimum de $E(\ell)$ fixe la taille et l'énergie du fondamental.

☞ Exercices d'application

EXERCICE 9 Neutrons rebondissant sur un miroir ✦✦✦✧✧

Des neutrons ultrafroids ($m_n = 1{,}675 \times 10^{-27}\,\mathrm{kg}$) tombent sur un miroir horizontal parfaitement réfléchissant situé en $z = 0$: ils sont confinés par $V(z) = m_n g z$ pour $z > 0$ et $V = +\infty$ pour $z < 0$ ($g = 9{,}81\,\mathrm{m\cdot s^{-2}}$).

Q-1) Par la méthode de minimisation, estimer l'extension verticale z_0 et l'énergie de l'état fondamental, en peV.

Q-2) Quelle hauteur maximale un neutron classique de même énergie atteindrait-il ? Commenter : l'expérience, réalisée en 2002, a mis en évidence des hauteurs caractéristiques d'une dizaine de micromètres.

VII Synthèse

★ À retenir

- Région $E > V$: $\mathrm{e}^{\pm \mathrm{i}kx}$, $k = \sqrt{2m(E-V)}/\hbar$; région $E < V$: $\mathrm{e}^{\pm qx}$, $q = \sqrt{2m(V-E)}/\hbar$; φ et φ' continues si V fini ; $\varphi = 0$ au bord d'un mur infini.
- Marche, $E > V_0$: $r = \frac{k_1-k_2}{k_1+k_2}$, $t = \frac{2k_1}{k_1+k_2}$, $R = r^2$, $T = \frac{4k_1k_2}{(k_1+k_2)^2}$, $R+T=1$; réflexion partielle sans équivalent classique.
- Marche, $E < V_0$: $R = 1$, onde évanescente e^{-qx}, profondeur de pénétration $\delta = \hbar/\sqrt{2m(V_0-E)}$, sans courant de probabilité.
- Barrière : effet tunnel ; $T \simeq 16\frac{E}{V_0}\left(1-\frac{E}{V_0}\right)\mathrm{e}^{-2a/\delta}$ si $a \gg \delta$; décroît avec a, $V_0 - E$ et m ; STM, radioactivité α.
- Puits infini : $\varphi_n = \sqrt{2/L}\sin(n\pi x/L)$, $E_n = n^2\frac{h^2}{8mL^2}$; quantification par les conditions aux limites (corde vibrante, $L = n\lambda/2$).
- Énergie de confinement $\sim \hbar^2/(mL^2)$ (Heisenberg) ; puits quelconque : minimiser $\frac{\hbar^2}{2m\ell^2} + V(\ell)$; oscillateur : $E_n = (n+\frac{1}{2})\hbar\omega$.

VIII Exercices d'approfondissement

EXERCICE 10 Puits de profondeur finie

★★★★☆

Un électron est dans le puits $V = -V_0$ pour $|x| < L/2$, $V = 0$ ailleurs, avec $V_0 = 1{,}0\,\mathrm{eV}$ et $L = 1{,}0\,\mathrm{nm}$. On cherche les états liés, d'énergie $-V_0 < E < 0$.

Q-1) Écrire la forme de φ dans chaque région. On admet que les états liés sont pairs ou impairs ; pour un état pair, on prend $\varphi = A\cos(kx)$ dans le puits et $\varphi = C\mathrm{e}^{-q|x|}$ à l'extérieur. Montrer que la continuité de φ'/φ en $x = L/2$ donne $k\tan(kL/2) = q$.

Q-2) On pose $u = kL/2$ et $u_0 = \frac{L}{2}\frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar}$. Montrer que $u\tan u = \sqrt{u_0^2 - u^2}$ et calculer u_0. Justifier graphiquement qu'il existe toujours au moins un état lié.

Q-3) La résolution numérique donne $u_1 = 1{,}119$ pour le fondamental et, pour le premier état impair, $u_2 = 2{,}147$. En déduire les énergies $E_n + V_0$ comptées depuis le fond du puits et les comparer à celles du puits infini de même largeur. Combien y a-t-il d'états liés ?

EXERCICE 11 Calcul guidé de la transmission d'une barrière

★★★★☆

On reprend la barrière du § IV ($0 < E < V_0$) en écrivant, dans la région II, $\varphi_{\mathrm{II}} = A_2\,\mathrm{ch}(qx) + B_2\,\mathrm{sh}(qx)$, et l'on choisit $A_1 = 1$.

Q-1) Écrire les quatre équations de raccordement en $x = 0$ et $x = a$.

Q-2) Exprimer A_2 et B_2 en fonction de B_1, puis montrer que $A_3\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}\left[\mathrm{ch}(qa) + \dfrac{k^2-q^2}{2\mathrm{i}kq}\mathrm{sh}(qa)\right] = 1$.

Q-3) En déduire $T = |A_3|^2$ et retrouver la formule fournie, puis son approximation pour $qa \gg 1$. Montrer que l'on retrouve le préfacteur $16\frac{E}{V_0}\left(1-\frac{E}{V_0}\right)$.

EXERCICE 12 Transmission résonante : l'effet Ramsauer-Townsend

En 1921, Ramsauer et Townsend observent que des électrons d'énergie voisine de $0{,}7\,\mathrm{eV}$ traversent un gaz d'argon presque sans être diffusés. On modélise un atome par un puits $V=-V_0$ sur une largeur a, avec $V_0=10\,\mathrm{eV}$; la transmission vaut $T=\left[1+\dfrac{V_0^2\sin^2(k_2a)}{4E(E+V_0)}\right]^{-1}$ avec $k_2=\sqrt{2m(E+V_0)}/\hbar$.

Q-1) À quelle condition la transmission est-elle totale ? Interpréter par analogie avec une lame à faces parallèles (interférences entre ondes réfléchies).

Q-2) Calculer la plus petite largeur a donnant $T=1$ pour $E=0{,}7\,\mathrm{eV}$. Comparer à la taille d'un atome.

Q-3) Que prévoit la mécanique classique ?

IX Classiques des concours

EXERCICE 13 Barrière de potentiel et microscope à effet tunnel

Un faisceau d'électrons non relativistes (masse m, énergie E) se propageant selon $+\vec{u}_x$ rencontre la barrière $V=V_0$ pour $0<x<a$, $V=0$ ailleurs, avec $0<E<V_0$.

Q-1) Que prévoit la mécanique classique ? Donner la forme des solutions stationnaires dans les trois régions et justifier l'absence d'onde en e^{-ikx} pour $x>a$.

Q-2) On donne $T=\left[1+\dfrac{(k^2+q^2)^2}{4k^2q^2}\mathrm{sh}^2(qa)\right]^{-1}$. Établir l'expression approchée pour $qa\gg1$ en fonction de $X=E/V_0$.

Q-3) Application : $V_0=3{,}0\,\mathrm{eV}$, $E=1{,}0\,\mathrm{eV}$, $a=1{,}0\,\mathrm{nm}$. Calculer q, vérifier que la barrière est épaisse et calculer T. Même question pour un proton.

Q-4) Dans un STM, on modélise le courant par $I=I_0\mathrm{e}^{-2qd}$. Le courant varie de $10\,\%$ quand la pointe passe au-dessus d'un atome ; de combien la distance a-t-elle varié ? Que se passerait-il si l'on utilisait des protons ?

EXERCICE 14 La loi de Geiger-Nuttall et le modèle de Gamow

Une particule α (charge $2e$, $m_\alpha c^2=3727\,\mathrm{MeV}$) d'énergie cinétique E est piégée dans un noyau de rayon R ; au-delà, elle subit la répulsion coulombienne du noyau fils de numéro atomique Z : $V(r)=\dfrac{2Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$. On donne $\dfrac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}=1{,}44\,\mathrm{MeV\cdot fm}$, $\hbar c=197\,\mathrm{MeV\cdot fm}$ et $c=3{,}0\times10^{23}\,\mathrm{fm\cdot s^{-1}}$. Le coefficient de transmission (fourni) vaut

$$T\simeq\exp\left\{-4\eta\left[\arccos\sqrt{x}-\sqrt{x(1-x)}\right]\right\},\qquad x=\frac{R}{r_c},\qquad \eta=\frac{2Ze^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar v},$$

où r_c est le point de rebroussement classique et v la vitesse de la particule à l'infini.

Q-1) Calculer la hauteur de la barrière en $r=R$ et le point de rebroussement r_c pour le polonium 212 ($Z=82$, $R=9{,}0\,\mathrm{fm}$, $E=8{,}78\,\mathrm{MeV}$). Pourquoi la mécanique classique interdit-elle la désintégration ?

Q-2) Calculer v, η puis T.

Q-3) La particule fait des allers-retours dans le noyau et tente sa chance à chaque arrivée sur la barrière, avec la fréquence $f=v/(2R)$. Calculer la demi-vie $t_{1/2}=\ln 2/(fT)$ et comparer à la valeur mesurée, $0{,}30\,\mu\mathrm{s}$.

Q-4) Pour l'uranium 238 ($Z=90$, $R=9{,}3\,\mathrm{fm}$, $E=4{,}20\,\mathrm{MeV}$), le même calcul donne $x=0{,}151$, $\eta=27{,}7$ et $T=7{,}2\times10^{-40}$. Calculer $t_{1/2}$ en années et comparer à la valeur mesurée, $4{,}5\times10^9\,\mathrm{ans}$. Conclure sur la sensibilité de la demi-vie à l'énergie.

EXERCICE 15 Puits quantique et détecteur infrarouge

Dans un puits quantique GaAs entre deux couches d'AlGaAs, les électrons se comportent comme des particules libres de masse effective $m^* = 0{,}067\,m_e$ confinées selon z sur une épaisseur $L = 10\,\text{nm}$. On modélise le puits comme infini.

Q-1) Calculer E_1 et E_2 en meV. Quelle est la longueur d'onde absorbée lors de la transition $1 \to 2$? Dans quel domaine se trouve-t-elle ?

Q-2) Ces détecteurs fonctionnent refroidis à $77\,\text{K}$. Comparer $E_2 - E_1$ à $k_B T$ à $77\,\text{K}$ et à $300\,\text{K}$ et justifier le refroidissement.

Q-3) En réalité, la profondeur du puits n'est que d'environ $0{,}25\,\text{eV}$. Dans quel sens se déplacent les niveaux par rapport au modèle infini ? L'état $n = 2$ reste-t-il lié ?

Q-4) Quelle épaisseur faudrait-il pour détecter à $\lambda = 10\,\mu\text{m}$ (modèle infini) ?