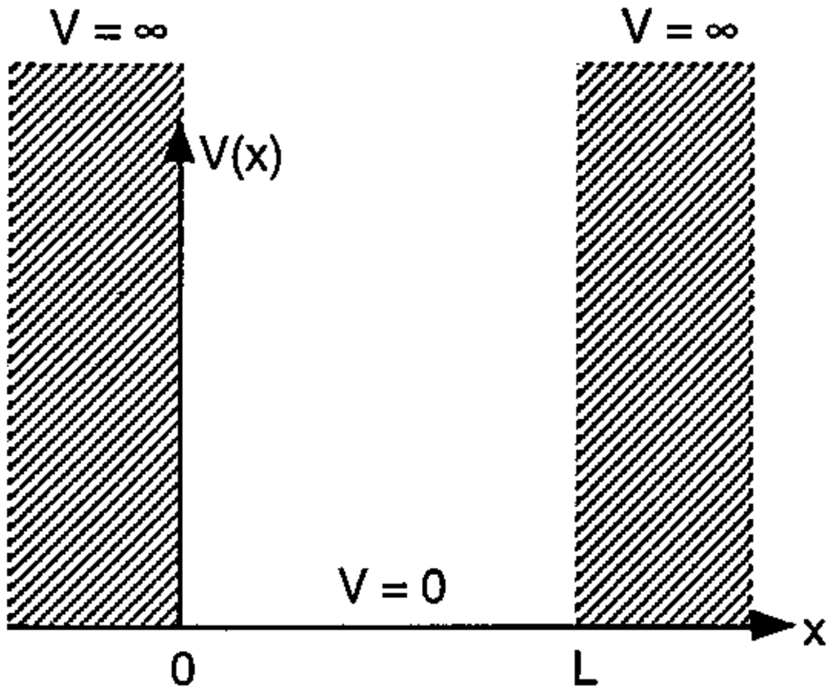
Exercice

Soit une particule de masse m se déplaçant librement suivant un axe Ox entre deux points d'abscisse x = 0 et x = L. A l'extérieur de cette région, on suppose que son énergie potentielle V = +∞



Cette "boîte de potentiel monodimensionnelle" permet, par exemple, de modéliser de manière simple le cas d'un électron se déplaçant dans un fil de longueur finie.

- Donner l'expression de l'opérateur hamiltonien à l'intérieur du puits de potentiel.

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$$

$$\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$$

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{d}{dx}$$

$$\hat{p}^2 = \hat{p}_x^2 = -i\hbar \frac{d}{dx}\left(-i\hbar \frac{d}{dx}\right)$$

$$\hat{p}^2 = i^2\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} = -\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2}$$

$$\hat{T} = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$$

- Donner l’expression de l’opérateur hamiltonien à l’intérieur du puits de potentiel.

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$$

$$\hat{V} = 0$$

$$\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$$

$$\boxed{\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}}$$

$$\hat{T} = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$$

- Montrer que la fonction d'onde $\psi(x) = A\cos(kx) + B\sin(kx)$ est fonction propre de l'opérateur hamiltonien. Par identification, trouver l'expression de l'énergie E de la particule en fonction de h, m et k.

$$\hat{H}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\left(A\cos(kx) + B\sin(kx)\right)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{d^2}{dx^2}\left(A\cos(kx)\right) + \frac{d^2}{dx^2}\left(B\sin(kx)\right)\right]$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{d}{dx}\left(-kA\sin(kx)\right) + \frac{d}{dx}\left(kB\cos(kx)\right)\right]$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\left[-k^2A\cos(kx) - k^2B\sin(kx)\right]$$

- Montrer que la fonction d'onde $\psi(x) = A\cos(kx) + B\sin(kx)$ est fonction propre de l'opérateur hamiltonien. Par identification, trouver l'expression de l'énergie E de la particule en fonction de h, m et k.

$$\hat{H}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[-k^2 A\cos(kx) - k^2 B\sin(kx)\right]$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}(-k^2)\left[A\cos(kx) + B\sin(kx)\right]$$

$$\hat{H}\psi = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\psi$$

Sachant $\hat{H}\psi = E\psi$

$$\Rightarrow E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

ψ est fonction propre de $\hat{H}$ et a pour valeur propre $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

- Utiliser les conditions de continuité aux limites du puits ($x=0$ et $x=L$) pour obtenir l'expression de $\psi(x)$ en fonction de B et k, ainsi que les différentes valeurs possibles de k. La valeur k=0 peut-elle convenir ? Donner l'expression de E en fonction des nouvelles valeurs.

A l'extérieur du puits, le potentiel est infini => donc la probabilité de trouver la particule à l'extérieur du puits est nulle donc $\psi(x) = 0$ à l'exterieur du puits

$$\psi(0) = 0 = A\cos(k.0) + B\sin(k.0) = A = 0$$

$$\Rightarrow \psi(x) = B\sin(kx)$$

$$\psi(L) = 0 = B\sin(kL) = 0 \iff kL = n\pi \text{ avec } n \text{ entier}$$

donc $k = \pm\dfrac{n\pi}{L}$

On choisit $k = \dfrac{n\pi}{L}$. Le signe importe peu car seul le carré de la fonction d'onde a un sens physique.

- Utiliser les conditions de continuité aux limites du puits (x=0 et x=L) pour obtenir l'expression de $\psi(x)$ en fonction de B et k, ainsi que les différentes valeurs possibles de k. La valeur k=0 peut-elle convenir ? Donner l'expression de E en fonction des nouvelles valeurs.

$$\Rightarrow \boxed{\psi(x) = B \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)}$$

$$\Downarrow$$

$$k=0 \Rightarrow n=0$$

Si $n=0$ $\psi(x)=0$ $\forall x$ $\Rightarrow$ il n'y a pas de particules dans le puits

$\Rightarrow$ la valeur $(k=0)$ n'est pas possible

$$\psi(x) = B \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \quad \text{avec } n \text{ entier} \neq 0$$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2 m L^2} = f(n^2)$$ $\Rightarrow$ quantification de l'énergie

- A partir de la condition de normalisation, trouver l'expression de la constante B. on utilisera : $\sin^2(ax) = ½[1 - \cos(2ax)]$.

Condition de normalisation : $\langle \psi | \psi \rangle = 1$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \psi \, dx = \underbrace{\int_{-\infty}^{0} \psi \psi^* dx}_{=0} + \int_{0}^{L} \psi^* \psi \, dx + \underbrace{\int_{L}^{+\infty} \psi^* \psi \, dx}_{=0}$$

$$\Rightarrow \int_0^L \psi^* \psi \, dx = 1$$

$$\Leftrightarrow \int_0^L \left[B \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)\right]^* \left[B \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)\right] dx$$

$$\Leftrightarrow \int_0^L B^2 \left[\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)\right]^2 dx = B^2 \int_0^L \left[\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)\right]^2 dx = 1$$

- A partir de la condition de normalisation, trouver l'expression de la constante B. on utilisera : $\sin^2(ax) = ½[1 - \cos(2ax)]$.

$$B^2 \int_0^L \left[\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)\right]^2 dx = B^2 \int_0^L \left[\frac{1}{2}\left(1 - \cos\left(2\frac{n\pi x}{L}\right)\right)\right] dx$$

$$= \frac{B^2}{2}\int_0^L dx - \frac{B^2}{2}\int_0^L \cos\left(\frac{2n\pi x}{L}\right) dx$$

$$= \frac{B^2}{2}\left[x\right]_0^L - \frac{B^2}{2}\left[\frac{1}{\frac{2n\pi}{L}}\sin\left(\frac{2n\pi x}{L}\right)\right]_0^L$$

$$= \frac{B^2 L}{2} - \frac{B^2}{2}\left[\frac{L}{2n\pi}\left(\sin\left(\frac{2n\pi \cancel{L}}{\cancel{L}}\right) - \sin(0)\right)\right]$$

$$= \frac{B^2 L}{2} - \frac{B^2}{2}(0 - 0) = \frac{B^2 L}{2} = 1 \Rightarrow B = \pm\sqrt{\frac{2}{L}}$$

- A partir de la condition de normalisation, trouver l'expression de la constante B. on utilisera : $\sin^2(ax) = ½[1 - \cos(2ax)]$.

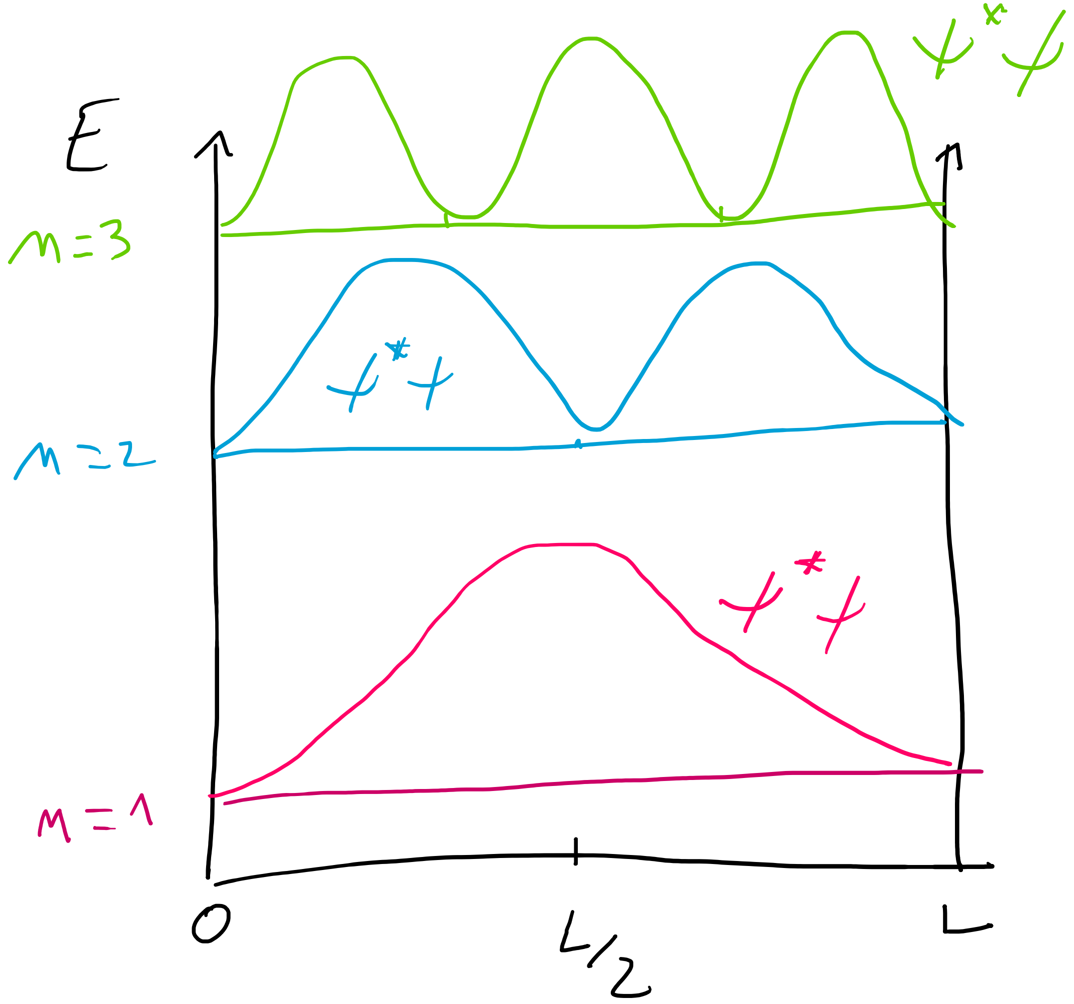
$$\frac{B^2 L}{2} = 1 \Rightarrow B = \pm\sqrt{\frac{2}{L}} \Rightarrow \text{On choisit}$$

arbitrairement $B = \sqrt{\frac{2}{L}}$

$$\Rightarrow \psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

- Tracer un diagramme énergétique qualitatif de E_n pour n = 1, 2, 3. Représenter sur ces niveaux d'énergie les fonctions $\psi^*(x).\ \psi(x)$ correspondantes. Conclusion.

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2 \qquad \psi^*(x)\psi(x) = \frac{2}{L}\left[\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)\right]^2$$



Remarques

- *Le niveau fondamental n'est pas nul ➔ la particule ne peut pas se trouver au repos (différence avec la physique classique)*
- *La quantification énergétique est liée à l'introduction des conditions aux limites (confinement de la particule)*
- *Lors que n augmente, on retrouve le résultat du cas classique, c'est-à-dire une distribution uniforme de la probabilité de présence ➔ on tend vers les résultats de la physique classique pour les grands nombres quantiques*
- *Si L augmente, la différence d'énergie entre 2 niveaux consécutifs diminue. Pour une boite de grande taille (macroscopique); les niveaux d'énergie forment un quasi-continuum ⇔ la particule est libre, son énergie peut prendre n'importe quelle valeur (disparition de la quantification)*

- Les électrons π de la molécule d'hexatriène ($H_2C=CH-CH=CH-CH=CH_2$) peuvent être considérés comme délocalisés dans un puits de potentiel de longueur L=7,3 Å. Calculer l'écart énergétique entre les 2 premiers niveaux d'énergie.

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2 = \frac{h^2}{4\pi^2} \frac{\pi^2}{2mL^2} n^2 = \frac{h^2}{8mL^2} n^2$$

$$\Delta E_{1/2} = \left| \frac{h^2}{8mL^2} (1^2 - 2^2) \right| = \frac{3h^2}{8mL^2} = \frac{3 . (6.62.10^{-34})^2}{8 . 9.1.10^{-31} . (7,3.10^{-10})^2}$$

$$= 3,39 . 10^{-19} \text{ J}$$

$$= 2,1 \text{ eV}$$

- Calculer de nouveau l'écart énergétique entre le niveau fondamental et le 1er état excité pour L = 1m. Vérifier que l'on tend vers une situation de la physique classique du point de vue énergétique lorsque L devient très grand.

Niveau fondamental = niveau de plus basse énergie

1er état excité = Second niveau de plus basse énergie

$$\Delta E_{1,2} = \frac{3h^2}{8mL^2} = \frac{3 \cdot (6,62 \cdot 10^{-34})^2}{8 \cdot 9,11 \cdot 10^{-31} \cdot 1^2} = 1,8 \cdot 10^{-37}\,J = \underbrace{1,1 \cdot 10^{-18}\,eV}$$

très faible ~ 0

Conclusion : lorsque L augmente ⇔ disparition du confinement et donc disparition de la quantification ⇔ La particule est libre

- Montrer que les $\psi_n(x)$, fonctions propres de l'opérateur $\widehat{H}$, , sont orthogonales
- Les fonctions $\psi_n(x)$ sont-elles fonctions propres de $\widehat{p_x}$? Qu'obtient-on par conséquent lors du calcul de $<p_x>$? Calculer la quantité $<p_x>$.
- Donner l'expression de la décomposition des $\psi_n(x)$ sur la base des fonctions propres de $\widehat{p_x}$, , en vous aidant des relations entre fonctions trigonométriques et exponentielles. Recalculer $<p_x>$ au moyen du résultat donné en cours concernant la mesure d'une observable A sur une fonction d'onde qui n'est pas fonction propre de l'opérateur associé $\hat{A}$. Quelle interprétation physique peut-on donner à cette décomposition ? Le résultat du calcul de $<p_x>$ vous paraît-il cohérent a posteriori ?
- Calculer $<p_x^2>$ en vous aidant de la relation fournie précédemment. Montrer que les expressions de $\widehat{H}$ et de ses valeurs propres permettent de retrouver ce résultat sans calcul intégral. En déduire Δp. Vérifier que la particule dans la boîte de potentiel satisfait aux inégalités de Heisenberg entre position et quantité de mouvement.

On donne

$$\int \sin(ax).\sin(bx)dx = \frac{\sin((a-b)x)}{2(a-b)} - \frac{\sin((a+b)x)}{2(a+b)} \quad \text{pour } a \neq b$$

$$\int \sin(ax).\cos(ax)dx = \frac{\sin^2(ax)}{2a}$$

$$\Delta x = \frac{L}{2\pi n}\sqrt{\frac{\pi^2 n^2}{3} - 2}$$

- Montrer que les $\psi_n(x)$, fonctions propres de l'opérateur $\hat{H}$, sont orthogonales

$$\boxed{\langle \psi_n | \psi_{n'} \rangle = 0}$$

$$= \int_0^L \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \cdot \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n'\pi x}{L}\right) dx$$

$$= \frac{2}{L} \int_0^L \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{n'\pi x}{L}\right) dx$$

$$= \frac{2}{L} \left[\frac{\sin\left(\frac{(n-n')\pi x}{L}\right)}{\frac{2(n-n')\pi}{L}} - \frac{\sin\left(\frac{(n+n')\pi x}{L}\right)}{\frac{2(n+n')\pi}{L}} \right]_0^L$$

n et n' sont entiers

donc $(n-n')$ et $(n+n')$ sont entiers

$$= \frac{2}{L} \cdot \frac{L}{\pi} \left(\frac{\sin[(n-n')\pi]}{2(n-n')} - \frac{\sin[(n+n')\pi]}{2(n+n')} \right) = 0$$

- Les fonctions $\psi_n(x)$ sont-elles fonctions propres de $\widehat{p_x}$? Qu'obtient-on par conséquent lors du calcul de $<p_x>$? Calculer la quantité $<p_x>$.

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{d}{dx} \qquad \hat{p}_x \psi(x) = -i\hbar \frac{d}{dx}\left(\sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)\right)$$

$$= -i\hbar \sqrt{\frac{2}{L}} \cdot \frac{n\pi}{L} \cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \neq \text{scalaire} * \psi(x)$$

$\Rightarrow$ $\psi(x)$ n'est pas fonction propre de $\hat{p}_x$

$$\langle p_x \rangle = \frac{\langle \psi | \hat{p}_x | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \langle \psi | \hat{p}_x | \psi \rangle \quad \text{car } \psi \text{ est normée}$$

- Les fonctions $\psi_n(x)$ sont-elles fonctions propres de $\widehat{p_x}$? Qu'obtient-on par conséquent lors du calcul de $\langle p_x \rangle$? Calculer la quantité $\langle p_x \rangle$.

$$\langle \psi | \hat{p}_x | \psi \rangle = \int_0^L \psi^* \hat{p}_x \psi \, dx$$

$$= \int_0^L \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)(-i\hbar)\sqrt{\frac{2}{L}} \cdot \frac{n\pi}{L} \cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx$$

$$= -i\hbar \frac{2}{L} \cdot \frac{n\pi}{L} \int_0^L \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx$$

$$= -i\hbar \frac{2n\pi}{L^2} \left[\frac{\sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right)}{2\frac{n\pi}{L}} \right]_0^L = 0$$

$$\Leftrightarrow \langle p_x \rangle = 0$$

- Donner l'expression de la décomposition des $\psi_n(x)$ sur la base des fonctions propres de $\widehat{p_x}$, , en vous aidant des relations entre fonctions trigonométriques et exponentielles. Recalculer $<p_x>$ au moyen du résultat donné en cours concernant la mesure d'une observable A sur une fonction d'onde qui n'est pas fonction propre de l'opérateur associé $\hat{A}$. Quelle interprétation physique peut-on donner à cette décomposition ? Le résultat du calcul de $<p_x>$ vous paraît-il cohérent a posteriori ?

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) = \sqrt{\frac{2}{L}} \left(\frac{e^{i\frac{n\pi x}{L}} - e^{-i\frac{n\pi x}{L}}}{2i} \right)$$

$$= \frac{1}{i\sqrt{2L}} e^{i\frac{n\pi x}{L}} - \frac{1}{i\sqrt{2L}} e^{-i\frac{n\pi x}{L}}$$

fonctions propres de $\hat{p}_x$

$$\hat{p}_x e^{i\frac{n\pi x}{L}} = -i\hbar \frac{d}{dx}\left(e^{i\frac{n\pi x}{L}}\right) = -i^2\hbar \frac{n\pi}{L} e^{i\frac{n\pi x}{L}} = \boxed{\frac{n\pi\hbar}{L}}\, e^{i\frac{n\pi x}{L}}$$

- Donner l'expression de la décomposition des $\psi_n(x)$ sur la base des fonctions propres de $\widehat{p_x}$, , en vous aidant des relations entre fonctions trigonométriques et exponentielles. Recalculer $<p_x>$ au moyen du résultat donné en cours concernant la mesure d'une observable A sur une fonction d'onde qui n'est pas fonction propre de l'opérateur associé $\hat{A}$. Quelle interprétation physique peut-on donner à cette décomposition ? Le résultat du calcul de $<p_x>$ vous paraît-il cohérent a posteriori ?

$$\hat{p}_x \, e^{-i\frac{\pi x n}{L}} = -i\hbar \frac{d}{dx}\left(e^{-i\frac{n\pi x}{L}}\right) = i^2 \frac{n\pi\hbar}{L} e^{-i\frac{n\pi x}{L}}$$

$$= \boxed{-\frac{n\pi\hbar}{L}} \, e^{-i\frac{n\pi x}{L}}$$

$$\langle p_x \rangle = \frac{1}{i\sqrt{2L}} \cdot \frac{1}{-i\sqrt{2L}} \cdot \frac{n\pi\hbar}{L} + \frac{1}{-i\sqrt{2L}} \cdot \frac{1}{i\sqrt{2L}} \cdot \left(-\frac{n\pi\hbar}{L}\right)$$

$$= 0$$

- Calculer <p_x^2> en vous aidant de la relation fournie précédemment. Montrer que les expressions de $\widehat{H}$ et de ses valeurs propres permettent de retrouver ce résultat sans calcul intégral. En déduire Δp. Vérifier que la particule dans la boîte de potentiel satisfait aux inégalités de Heisenberg entre position et quantité de mouvement.

$$\langle p_x^2 \rangle = \frac{\langle \psi | \hat{p}_x^2 | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}$$

$$\hat{H}\psi = E\psi \qquad E = E_c + E_p \qquad E_p = 0 \quad (V = 0)$$

$$E = E_c = \frac{p^2}{2m} \iff p^2 = 2m\,E = p_x^2$$

$$\langle p_x^2 \rangle = 2m \langle E \rangle = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2mL^2} \cdot 2m = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{L^2}$$

$$\Delta p = \Delta p_x = \sqrt{\langle p_x^2 \rangle - \langle p_x \rangle^2}$$

- Calculer $<p_x^2>$ en vous aidant de la relation fournie précédemment. Montrer que les expressions de $\hat{H}$ et de ses valeurs propres permettent de retrouver ce résultat sans calcul intégral. En déduire Δp. Vérifier que la particule dans la boîte de potentiel satisfait aux inégalités de Heisenberg entre position et quantité de mouvement.

$$<p_x^2> = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{L^2} \qquad <p_x> = 0 \qquad \Delta x = \frac{L}{2\pi n}\sqrt{\frac{\pi^2 n^2}{3}-2}$$

$$\Delta p_x = \sqrt{\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{L^2}} = \frac{n\pi\hbar}{L}$$

$$\Delta x \cdot \Delta p_x = \frac{\cancel{L}}{2\cancel{\pi}\cancel{n}}\sqrt{\frac{\pi^2 n^2}{3}-2} \cdot \frac{\cancel{n}\cancel{\pi}\hbar}{\cancel{L}} = \frac{\hbar}{2}\sqrt{\frac{\pi^2 n^2}{3}-2}$$

$$\pi^2 > 3^2 \iff \pi^2 n^2 > 3^2 n^2 \iff \frac{\pi^2 n^2}{3} > 3n^2$$

$$\frac{\pi^2 n^2}{3} - 2 > 3n^2 - 2 > 1 \quad \forall n \quad \text{donc } \Delta x \cdot \Delta p_x > \frac{\hbar}{2}$$