PC 4 : Quantification de l'énergie

Dernière modification 12 mai 2023

Exercice 1 : Le puits infini à une dimension

On considère une particule de masse m dans un puits de potentiel unidimensionnel délimité par des barrières de hauteur infinie situées en $x = 0$ et $x = L$:

$$V(x) = \begin{cases} +\infty & \textbf{pour } x < 0 \\ 0 & \textbf{pour } x \in [0, L] \\ +\infty & \textbf{pour } x > L \end{cases} \tag{1}$$

Q1 On peut chercher des solutions réelles sans perte de généralité. Écrire la solution générale réelle de l'équation de Schrödinger indépendante du temps d'énergie E dans le potentiel V.

D'abord, on écritl'équation de Schrödinger indépendante du temps à une dimension

$$\frac{d}{dx^2}\psi(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\psi(x) = 0. \tag{2}$$

Si $x < 0$ ou $x > L$, on a $\psi(x) = 0$. Alors, si $0 < x < L$,

$$\frac{d}{dx^2}\psi(x) = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x). \tag{3}$$

C'est l'équation pour le mouvement harmonique simple avec $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$.

Donc,

$$\psi(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < 0 \\ A\cos(kx) + B\sin(kx) & \text{si } x \in [0, L] \\ 0 & \text{si } x > L. \end{cases} \tag{4}$$

Q2 Montrer que le spectre des énergies permises est discret.

On utilise les conditions aux bords,

$$\begin{cases} \psi(0^-) = \psi(0^+) \\ \psi(L^-) = \psi(L^+). \end{cases} \tag{5}$$

Donc,

$$\begin{cases} A = 0 \\ B\sin(kL) = 0. \end{cases} \tag{6}$$

On note que $\sin(kL) = 0 \iff L = \frac{n\pi}{k_n} = n\pi\sqrt{\frac{\hbar^2}{2mE_n}}, n \in \mathbb{N}$. Donc,

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2mL^2}n^2\pi^2 \tag{7}$$

Q3 Montrer que les fonctions d'onde stationnaires $\psi_n(x)$ d'énergies respectives E_n peuvent s'écrire $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin(\frac{n\pi x}{L})$.

En utilisant (7), on note que $k_n = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}\frac{\hbar^2}{2mL^2}n^2\pi^2} = \frac{n\pi}{L}$.
Pour calculer $\psi_n(x)$ on utilise la condition de normalisation,

$$\int_0^L |\psi_n(x)|^2 dx = 1 \iff \int_0^L B^2\sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right)dx = 1. \tag{8}$$

En utilisant l'identité $\sin(\frac{\theta}{2}) = \frac{1-\cos(\theta)}{2}$, on obtient

$$\begin{aligned} \int_0^L B^2\sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right)dx &= \int_0^L \frac{B^2}{2}dx - \int_0^L \frac{B^2}{2}\cos(\frac{2n\pi}{L}x)dx \\ &= \frac{B^2L}{2} - \frac{B^2}{2n\pi}\sin(\frac{2n\pi}{L}x)\Big|_{x=0}^{x=L} \\ &= \frac{B^2}{L}. \end{aligned} \tag{9}$$

$$\frac{B^2L}{2} = 1 \iff B = \sqrt{\frac{2}{L}}. \tag{10}$$

Donc, $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin(\frac{n\pi x}{L})$.

Q4 Comparer l'état fondamental (le minimum d'énergie) au cas classique. Interpreter.

Dans le cas classique, l'état fondamental a $E = 0$. Au cas quantique, $E_1 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2} > 0$
Par l'inegalité de Heisenberg, si $\Delta x < L \implies \Delta p \geq \frac{\hbar}{2L}$. Donc,

$$E = \frac{p^2}{2m} \simeq \frac{\Delta p^2}{2m} \geq \frac{\hbar^2}{2mL^2} > 0. \tag{11}$$

Q5 Calculer $\langle x\rangle$, $\langle x^2\rangle$ pour l'état stationnaire $\psi_n(x)$. En déduire *Deltax* et intrepreter l'expression obtenue à grand n.

Calculer $\langle x \rangle$

$$
\begin{aligned}
\langle x \rangle &= \int_0^L x|\psi_n(x)|^2 dx \\
&= \int_0^L \frac{2x}{L}\sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx \\
&= \int_0^L \frac{x}{L}\left(1-\cos\left(\frac{2n\pi x}{L}\right)\right) dx \\
&= \int_0^L \frac{x}{L} dx - \int_0^L \frac{x}{L}\cos\left(\frac{2n\pi x}{L}\right) dx \\
&= \frac{L^2}{2L} - \frac{x}{L}\cdot\frac{L}{2n\pi}\sin\left(\frac{2n\pi x}{L}\right)\Bigg|_{x=0}^{x=L} + \int_0^L \frac{1}{2n\pi}\sin\left(\frac{2n\pi x}{L}\right) dx \\
&= \frac{L}{2} - L\cos\left(\frac{2n\pi x}{L}\right)\Bigg|_{x=0}^{x=L} \\
&= \frac{L}{2}.
\end{aligned}
\tag{12}
$$

Calculer $\langle x^2 \rangle$

$$
\begin{aligned}
\langle x^2 \rangle &= \int_0^L \frac{2x^2}{L}\sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx \\
&= \int_0^L \frac{x^2}{L}\left(1-\cos\left(\frac{2n\pi x}{L}\right)\right) dx \\
&= \int_0^L \frac{x^2}{L} dx - \int_0^L \frac{x^2}{L}\cos\left(\frac{2n\pi x}{L}\right) dx
\end{aligned}
\tag{13}
$$

Integration par parties tabular (*Méthode Tic Tac Toe*)

$$
\begin{array}{ccc}
\frac{x^2}{L} & \cos\left(\frac{2n\pi x}{L}\right) & \\
\frac{2x}{L} & \frac{L}{2n\pi}\sin\left(\frac{2n\pi x}{L}\right) & + \\
\frac{2}{L} & -\left(\frac{L}{2n\pi}\right)^2\cos\left(\frac{2n\pi x}{L}\right) & - \\
0 & -\left(\frac{L}{2n\pi}\right)^3\sin\left(\frac{2n\pi x}{L}\right) & +
\end{array}
$$

Donc,

$$
\int \frac{x^2}{L}\cos\left(\frac{2n\pi x}{L}\right) = \frac{x^2}{2n\pi}\sin\left(\frac{2n\pi x}{L}\right) + \frac{xL}{2n^2\pi^2}\cos\left(\frac{2n\pi x}{L}\right) - \frac{L^2}{4n^3\pi^3}\sin\left(\frac{2n\pi x}{L}\right). \tag{14}
$$

On revient à $\langle x^2 \rangle$,

$$
\langle x^2 \rangle = \frac{L^3}{3} - \frac{L^2}{2n^2\pi^2}. \tag{15}
$$

Calculer Δx

Par définition,

$$\Delta x = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \frac{L^2}{12} - \frac{L^2}{2n^2\pi^2}. \tag{16}$$

On note que

$$\lim_{n \to +\infty} \Delta x = \frac{L^2}{12}, \tag{17}$$

la variance de la distribution uniforme $\mathcal{U}(0, L)$.

Exercice 2 : États non stationnaires

On considère une particule préparée, à l'instant $t = 0$, dans une superposition :

$$\psi(x, t = 0) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_1(x) + \psi_2(x)], \tag{18}$$

$\psi_1(x)$ et $\psi_2(x)$ étant les fonctions d'onde associées aux 2 états de plus baisse énergie du puits infini de l'exercice précédent.

Q1 Calculer $\psi(x, t)$. Si on effectue une mesure de l'énergie sur ce système au temps t, quels sont les résultats possibles et avec quelles probabilités ? Quelle est la valeur moyenne de l'énergie et son écart-type ?

L'évolution temporelle des $\psi_n(x)$ est donné sous la forme séparable

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_1(x)e^{\frac{-iE_1t}{\hbar}} + \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_2(x)e^{\frac{-iE_2t}{\hbar}} \tag{19}$$

Les résultats possibles d'une mesure d'énergie sont E_1 et $E_2 = 4E_1$ avec probabilités $\frac{1}{2}$ et $\frac{1}{2}$. Donc,

$$\begin{cases} \langle E \rangle = \frac{E_1+E_2}{2} = \frac{5}{2}E_1 \\ \langle E^2 \rangle = \frac{E_1^2+E_2^2}{2} = \frac{17}{2}E_1^2 \\ \Delta E^2 = \left(\frac{E_1-E_2}{2}\right)^2 = \frac{9}{4}E_1^2 \\ \Delta E = \frac{|E_1-E_2|}{2} = \frac{3}{2}E_1. \end{cases} \tag{20}$$