

## Quantique TD3 : Fonction d'onde - Équation de Schrödinger

### Ex1: Fonction d'onde - Probabilité de présence

On étudie une particule dont la fonction d'onde, définie  $\forall x \in [0; +\infty[$ , vaut:

$$\psi(x) = \psi_0 e^{-\frac{x}{x_0}}$$

où  $x_0$  est une constante fixée et  $\psi_0$  est une constante à déterminer.

1. Donner la fonction de répartition de probabilité de présence de la particule pour  $x \in [0; +\infty[$  en fonction de  $\psi_0$ ,  $x_0$  et  $x$ .

La fonction de répartition de probabilité de présence de la particule pour  $x \in [0; +\infty[$  est:

$P = \int_0^\infty |\psi(x)|^2 dx$  avec  $|\psi(x)|^2$  la densité de probabilité de présence.

$$\begin{aligned} P &= \int_0^\infty \psi_0^2 e^{-\frac{2x}{x_0}} dx \\ &= \psi_0^2 \left[ -\frac{x_0}{2} e^{-\frac{2x}{x_0}} \right]_0^{+\infty} \\ &= \psi_0^2 \left( \frac{-x_0}{2} \right) \left( \lim_{x \rightarrow \infty} e^{-\frac{2x}{x_0}} - e^0 \right) \\ &= \psi_0^2 \left( -\frac{x_0}{2} \right) (0 - 1) \\ P &= \psi_0^2 \frac{x_0}{2} \end{aligned}$$

2. En utilisant la condition de normalisation de la fonction d'onde, déterminer la valeur de la constante  $\psi_0$ .

Condition de normalisation :  $P = 1$  (dans l'espace  $[0; +\infty[$ ) donc :

$$\psi_0^2 \frac{x_0}{2} = 1 \iff \psi_0^2 = \frac{2}{x_0} \iff \psi_0 = \sqrt{\frac{2}{x_0}}; x_0 > 0$$

3. Quelle est la probabilité de trouver la particule dans l'intervalle  $[0;A]$ ?

$$\begin{aligned}
 P_{[0;A]} &= \int_0^A |\psi(x)|^2 dx \\
 &= \int_0^A \psi_0^2 e^{-\frac{2x}{x_0}} dx \\
 &= \int_0^A \frac{2}{x_0} \times e^{-\frac{2x}{x_0}} dx \\
 &= \frac{2}{x_0} \left[ -\frac{x_0}{2} (e^{-\frac{2x}{x_0}}) \right]_0^A \\
 &= -1 \left[ e^{-\frac{2A}{x_0}} - 1 \right] \\
 &= 1 - e^{-\frac{2A}{x_0}}
 \end{aligned}$$

4. Que doit valoir A pour que cette probabilité soit au minimum de 95 % ? On donnera en fonction de  $x_0$  un résultat approché en prenant  $\ln(0,05) \approx -3$ .

$$\begin{aligned}
 P \geq 95\% &\iff 1 - e^{-\frac{2A}{x_0}} \geq 0,95 \\
 &\iff e^{-\frac{2A}{x_0}} - 1 \leq -0,95 \\
 &\iff e^{-\frac{2A}{x_0}} \leq 0,05 \\
 &\iff \ln\left(e^{-\frac{2A}{x_0}}\right) \leq \ln(0,05) \\
 &\iff -\frac{2A}{x_0} \leq -3 \\
 &\iff A \approx \frac{3x_0}{2}
 \end{aligned}$$

### Ex2: Particule dans un puits de potentiel infini

On étudie une particule de masse m dans le puits de potentiel infini suivant:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x \in [0; L] \\ +\infty & \text{sinon} \end{cases}$$

On veut connaître les états d'énergie accessibles à la particule, ainsi que l'allure des fonctions d'onde associées à chaque niveau d'énergie.

1. Pour  $x \in [0;L]$ , donner l'équation de Schrödinger vérifiée par la fonction d'onde  $\psi$  de la particule dans le puits de potentiel infini, en fonction de la constante de Planck réduite à  $\hbar$  ( $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ ), de m et de l'énergie E de la particule.  
Équation de Schrodinger (entre 0 et L,  $V=0$ ):  $\mathcal{H}\psi = E\psi \implies$

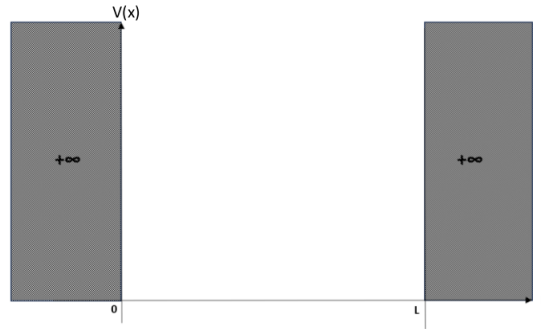


Figure 1: Puits de potentiel infini de largeur L

$$\begin{aligned}
 E\psi(x) &= -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(x) + V\psi(x) \\
 &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + V\psi(x) \\
 &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V\right)\psi(x) \text{ or } \begin{cases} V = 0 \\ \Delta = \frac{\delta^2}{\delta x^2} \end{cases} \text{ donc} \\
 &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\delta^2\psi(x)}{\delta x^2}
 \end{aligned}$$

2. Donner la forme générale des solutions  $\psi(x)$  de l'équation de Schrödinger sur ce domaine.

D'après la question précédente, on a  $E\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\delta^2\psi(x)}{\delta x^2}$

Or  $E = E_c + E_p = \frac{1}{2}mv^2 + 0$  et  $p = mv$

$$\begin{aligned}
 E &= \frac{p^2}{2m} \text{ or, par la propriété onde-corpuscule: } p = \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{2\pi} \frac{2\pi}{\lambda} \\
 &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m}
 \end{aligned}$$

Avec les derniers résultats obtenu, on a:

$$\begin{aligned}
 \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\psi(x) &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\delta^2\psi(x)}{\delta x^2} \iff \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\delta^2\psi(x)}{\delta x^2} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\psi(x) = 0 \\
 &\iff \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \psi(x) = 0 \\
 &\iff \psi(x)'' + k^2\psi(x) = 0
 \end{aligned}$$

La forme générale des solutions  $\psi(x)$  est donc :  $\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx)$

3. Quelles sont les conditions aux limites  $\psi(0)$  et  $\psi(L)$ ? Utiliser ces conditions pour déterminer certaines des constantes de la solution générale  $\psi(x)$ .

$$\begin{cases} \psi(x=0) = 0(1) \implies B = 0 \\ \psi(x=L) = 0(2) \end{cases}$$

D'après (2),  $\psi(x = L) = A \sin(kL) = 0 \implies kL = n\pi \implies k = \frac{n\pi}{L}$ ,  $\sin$  est  $\pi$ -périodique et  $\forall n \in \mathbb{N}^*$

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

4. Quel vaut  $\int_0^L |\psi(x)|^2 dx$  ? Utiliser ce résultat pour déterminer complètement l'expression de  $\psi(x)$ .

Pour calculer A, on utilise la condition de normalisation (entre 0 et L):  $\int_0^L |\psi(x)|^2 dx = 1$  donc

$$\begin{aligned} \int_0^L A \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) dx &= 1 \iff \int_0^L \frac{A^2}{2} \left(1 - \cos\left(\frac{2n\pi x}{L}\right)\right) dx = 1 \\ &\iff \frac{A^2}{2} \left[ \int_0^L dx - \int_0^L \cos\left(\frac{2n\pi x}{L}\right) dx \right] \\ &\iff P_{[0,L]} = \frac{A^2}{2} L = 1 \\ &\iff A = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \end{aligned}$$

5. Reporter ce résultat dans l'équation de Schrödinger pour déterminer les valeurs d'énergie accessibles à la particule. Comment interprétez-vous ce résultat ? Quel facteur de l'expression peut être qualifié de "nombre quantique" associé au niveau d'énergie ?

On rappelle que  $\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} \\ \psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \end{cases}$

$$\begin{aligned} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} &= \frac{d}{dx} \left( \frac{d\psi(x)}{dx} \right) \\ &= \frac{d}{dx} \left( \sqrt{\frac{2}{L}} \times \frac{n\pi}{L} \cos\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \right) \\ &= \sqrt{\frac{2}{L}} \left( \frac{n\pi}{L} \right) \left( -\frac{n\pi}{L} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \right) \\ &= -\sqrt{\frac{2}{L}} \left( \frac{n^2\pi^2}{L^2} \right) \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \\ &= -\frac{n^2\pi^2}{L^2} \times \psi(x) \end{aligned}$$

On revient à l'équation de Schrodinger :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( -\frac{n^2\pi^2}{L^2} \right) \psi(x) = E\psi(x) \implies E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2} \times n^2$$

6. Schématiser le diagramme d'énergie en traçant sur chaque niveau l'allure de la fonction de probabilité de présence  $|\psi(x)|^2$  pour  $x \in [0;L]$ .

$$\begin{cases} \psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \\ E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2} \times n^2 \\ |\psi(x)|^2 = \frac{2}{L} \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \end{cases} \implies \begin{cases} n = 1 : E_1 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2} = E_f \\ n = 2 : E_2 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2} \times 2^2 = 4E_f \\ \forall n \in \mathbb{N}^* : E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2} \times n^2 = n^2 E_f \end{cases}$$

### Ex3: Boîte quantique

On s'intéresse maintenant au puits quantique 3D : la boîte quantique. La fonction d'onde  $\psi(x, y, z)$  associée à une particule de masse  $m$  présente dans la boîte est alors fonction des trois variables de l'espace. Le potentiel  $V(x, y, z)$  est nul dans la boîte, infini en-dehors :

$$V(x, y, z) = \begin{cases} 0 & \text{si } (x, y, z) \in [0; a] \times [0; b] \times [0; c] \\ +\infty & \text{sinon} \end{cases}$$

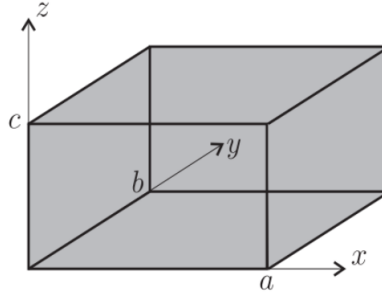


Figure 2: Boîte quantique de dimensions  $a \times b \times c$

1. Rappeler l'équation de Schrödinger appliquée à  $\psi$  en fonction de  $\hbar$ ,  $m$ , de l'énergie  $E$  de la particule et des dérivées partielles secondes spatiales de  $\psi$ .

De manière analogue au cas 1D, on montre que:

$$\psi(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{abc}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \sin\left(\frac{p\pi}{b}y\right) \sin\left(\frac{q\pi}{c}z\right)$$

2. Identifier les facteurs pouvant être qualifiés de nombres quantiques associés à chaque niveau d'énergie.
3. Utiliser l'équation de Schrödinger pour déterminer les niveaux d'énergie accessibles en fonction notamment des nombres quantiques.
4. Pour le cas particulier  $a = b = c$ , donner l'expression du plus petit niveau d'énergie  $E_f$  en fonction de  $\hbar$ ,  $m$  et  $a$ . Pour quelles valeurs des nombres quantiques ce niveau est-il atteint ?
5. Lorsque  $N$  jeux de nombres quantiques permettent d'atteindre un même niveau d'énergie, l'on dit ce niveau d'énergie est de degré de dégénérescence  $N$ . Compléter le tableau suivant pour les trois premiers niveaux d'énergie. Donner leur énergie en fonction de  $E_f$ .

| Niveau | Nombres quantiques | Énergie | Degré de dégénérescence $N$ |
|--------|--------------------|---------|-----------------------------|
| 1      |                    |         |                             |
| 2      |                    |         |                             |
| 3      |                    |         |                             |

*Rappel : opérateur laplacien scalaire en coordonnées cartésiennes :*

$$1D : \Delta = \frac{d^2}{dx^2}; 3D : \Delta = \frac{\delta^2}{\delta x^2} + \frac{\delta^2}{\delta y^2} + \frac{\delta^2}{\delta z^2}$$

### Notes de cours

L'équation de Schrodinger est équivalente au PFD.

$$H\psi = E\psi \quad \begin{array}{l} \bullet H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V: \text{ opérateur Hamiltonien} \\ \bullet E: \text{ opérateur} \end{array}$$

Pour rappel :  $\Delta$  est l'opérateur Laplacien qui correspond à la somme des dérivés secondes partielles de chaque variables.

$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V\psi = E\psi$  qui donne  $\psi(x,y,z,t)$  = fonction d'onde qui caractérise l'état de la particule donc donne:

$$\begin{cases} \text{la probabilité de présence} \\ \text{l'énergie de la particule} \end{cases} \quad \begin{cases} \text{état stationnaire} \implies \psi(x,y,z) \\ \text{système à une dimension} \implies \psi(x) \end{cases}$$

On en conclut donc que l'équation de Schrodinger à l'état stationnaire et à une dimension :

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

On note que c'est une dérivé totale car dérivé partielle mais il n'y a qu'une variable.

La densité de probabilité de présence  $dP$  se calcule ainsi :  $dP = |\psi(x)|^2 dx$  qui correspond au carré du module de la fonction d'onde  $\psi(x)$ .

La répartition de la probabilité de présence dans une intervalle donné  $P$  se calcule ainsi :  $\int_a^b |\psi(x)|^2 dx$ .

La condition de la normalisation (probabilité de trouver la particule dans l'espace  $(]-\infty; +\infty[)$  :

$$P = 1 = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx$$

$$\cos(2a) = 2\sin(a)\cos(a) \text{ et } \sin(2a) = 1 - \sin^2(a) \text{ et } \sin^2(a) = (1 - \cos(2a))/2$$