Quantique TD3 : Fonction d'onde - Équation de Schr$\ddot{o}$dinguer

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 ψ_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 ψ_0, x_0 et x.
   La fonction de répartiton de probabilité de présence de la particule pour x$\in$[0;+∞[est:
   P = $\int_0^\infty |\psi(x)|^2 dx$ avec $|\psi(x)|^2$ la densité de probabilité de présence.

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

2. En utilisant la condition de normalisation de la fonction d'onde, déterminer la valeur de la constante ψ_0.
   Condition de normalisation : P = 1 (dans l'espace [0;+∞[) donc :

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

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.

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

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 connaitre 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 Schr$\ddot{o}$dinguer vérifiée par la fonction d'onde ψ 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 Schrodinguer (entre 0 et L, V=0): $\mathcal{H}\psi = E\psi \Longrightarrow$

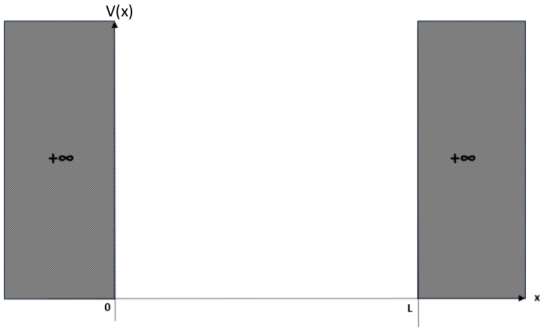

Figure 1: Puits de potentiel infini de largeur L

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

2. Donner la forme générale des solutions ψ(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 obtenus, on a:

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

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

3. Quelles sont les conditions aux limites ψ(0) et ψ(L)? Utiliser ces conditions pour déterminer certaines des constantes de la solution générale ψ(x).
$$\begin{cases} (1)\psi(x=0) = 0 \Longrightarrow B = 0 \\ (2)\psi(x=L) = 0 \end{cases}$$

D'après (2), $\psi(x = L) = A\sin(kL) = 0 \Longrightarrow kL = n\pi$ car A différent de 0 mais sin peut être nul $\Longrightarrow k = \frac{n\pi}{L}$, sin est π-périodique et $\forall n \in \mathbb{N}^*$

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

4. Que vaut $\int_0^L |\psi(x)|^2 dx$? Utiliser ce résultat pour déterminer complètement l'expression de ψ(x).
Pour calculer A, on utilise la condition de normalisation (entre 0 et L): $\int_0^L |\psi(x)|^2 dx = 1$ donc

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

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

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

On revient à l'équation de Schrodinguer :
$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(-\frac{n^2\pi^2}{L^2}\right)\psi(x) = E\psi(x) \Longrightarrow E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}\times n^2$

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].

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

Ex3: Boîte quantique
On s'intéresse maintenant au puits quantique 3D : la boîte quantique. La fonction d'onde ψ(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 :

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

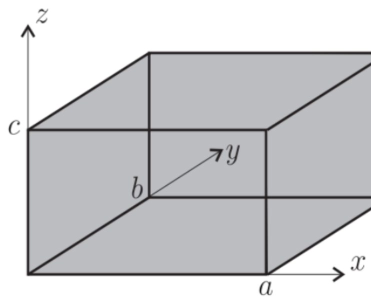

Figure 2: Boîte quantique de dimensions a×b×c

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

$$\begin{aligned} \mathcal{H}\psi = E\psi &\iff \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V\right)\psi = E\psi \\ &\iff -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z) \end{aligned}$$

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

2. Identifier les facteurs pouvant être qualifiés de nombres quantiques associés à chaque niveau d'énergie.
Les facteurs pouvant être qualifiés de nombres quantiques associés à chaque niveau d'énergie sont n, p et q.

3. Utiliser l'équation de Schrödinger pour déterminer les niveaux d'énergie accessibles en fonction notamment des nombres quantiques. (On développera pour la dérivé partielle par rapport à x) D'après l'ex 2, on a :

$$\begin{aligned}\psi(x,y,z) &= \sqrt{\frac{2}{L_x}}\sin(\frac{n\pi}{L_x}x)\times\sqrt{\frac{2}{L_y}}\sin(\frac{p\pi}{L_y}y)\times\sqrt{\frac{2}{L_z}}\sin(\frac{q\pi}{L_z}z)\\ &= \sqrt{\frac{2\times2\times2}{L_x+L_y+L_z}}\sin(\frac{n\pi}{L_x}x)\sin(\frac{p\pi}{L_y}y)\sin(\frac{q\pi}{L_z}z)\\ &= \sqrt{\frac{8}{L_x+L_y+L_z}}\sin(\frac{n\pi}{L_x}x)\sin(\frac{p\pi}{L_y}y)\sin(\frac{q\pi}{L_z}z)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{\delta\psi(x,y,z)}{\delta x^2} &= \left(\sqrt{\frac{8}{abc}}\sin(\frac{n\pi}{a}x)\sin(\frac{p\pi}{b}y)\sin(\frac{q\pi}{c}z)\right)''\\ &= \left(\sqrt{\frac{8}{abc}}\frac{n\pi}{a}\cos(\frac{n\pi}{a}x)\sin(\frac{p\pi}{b}y)\sin(\frac{q\pi}{c}z)\right)'\\ &= \sqrt{\frac{8}{abc}}\left(-\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2\right)\sin(\frac{n\pi}{a}x)\sin(\frac{p\pi}{b}y)\sin(\frac{q\pi}{c}z)\\ &= -\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2\psi(x,y,z)\\ \frac{\delta\psi(x,y,z)}{\delta y^2} &= \sqrt{\frac{8}{abc}}\sin(\frac{n\pi}{a}x)\left(-\left(\frac{p\pi}{b}\right)^2\right)\sin(\frac{p\pi}{b}y)\sin(\frac{q\pi}{c}z)\\ &= -\left(\frac{p\pi}{b}\right)^2\psi(x,y,z)\\ \frac{\delta\psi(x,y,z)}{\delta z^2} &= \sqrt{\frac{8}{abc}}\sin(\frac{n\pi}{a}x)\sin(\frac{p\pi}{b}y)\left(-\left(\frac{q\pi}{c}\right)^2\right)\sin(\frac{q\pi}{c}z)\\ &= -\left(\frac{q\pi}{c}\right)^2\psi(x,y,z)\end{aligned}$$

or $-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z)$ donc

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)\left(-\left(\frac{n^2\pi^2}{a^2}+\frac{p^2\pi^2}{b^2}+\frac{q^2\pi^2}{c^2}\right)\right)\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z)$$

On identifie $E_{n,p,q} = \dfrac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left(\dfrac{n^2}{a^2}+\dfrac{p^2}{b^2}+\dfrac{q^2}{c^2}\right)$

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 ?
   a = b = c donc $E_{n,p,q} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma}(n^2+p^2+q^2)$.
   E_f est l'énergie de l'état fondamentale (énergie minimale) correspondant à Σn_i^2 minimale, càd n=p=q=1:
$$E_f = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}(1^2+1^2+1^2) = \frac{3}{2}\times\frac{\hbar^2\pi^2}{ma^2}$$

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.
   $E_n = \frac{3}{2}\frac{\hbar^2\pi^2}{ma^2}\times\Sigma n_i^2$. Ex:
   Pour n=2 : ((1,1,2),(1,2,1),(2,1,1))
$$\begin{aligned}E_2 &= \frac{3}{2}\frac{\hbar^2\pi^2}{ma^2}\times\Sigma n_i^2 = \frac{3}{2}\frac{\hbar^2\pi^2}{ma^2}\times(1+1+4)\\ &= \frac{3}{2}\frac{\hbar^2\pi^2}{ma^2}\times 6 = 2\left(\frac{3}{2}\frac{\hbar^2\pi^2}{ma^2}\right)\\ &= 2E_f\end{aligned}$$

Niveau	Nombres quantiques	Énergie	Degré de dégénérescence N
1	(1,1,1)	$E_f = \frac{3}{2}\frac{\hbar^2\pi^2}{ma^2}$	N=1
2	{(1,1,2),(1,2,1),(2,1,1)}	$E_2 = 2E_f$	N=3
3		$E_3 = 3E_f$	N=3
4		$E_4 = \frac{11}{3}E_f$	N=3
5		$E_5 = 4E_f$	N=1

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 Schrodinguer est équivalente au PFD.

$$H\psi = E\psi$$

- H $= -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V$: opérateur Hamiltonien
- E: opérateur

Pour rappel : Δ 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 ψ(x,y,z,t) = fonction d'onde qui caractérise l'état de la particule donc donne:

$\begin{cases} \text{la probabilité de présence} \\ \text{l'énergie de la particule} \end{cases}$

$\begin{cases} \text{état stationnaire} \Longrightarrow \psi(x,y,z) \\ \text{système à une dimension} \Longrightarrow \psi(x) \end{cases}$

On en conclut donc que l'équation de Schrodinguer 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 (]-∞;+∞[):
P = 1 = $\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx$
cos(2a) = 2sin(a)cos(a) et sin(2a) = 1-sin2(a) et sin2(a) = (1-cos(2a))/2