

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 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 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 ψ_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 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 Schrodinger (entre 0 et L, V=0): $\mathcal{H}\psi = E\psi \implies$

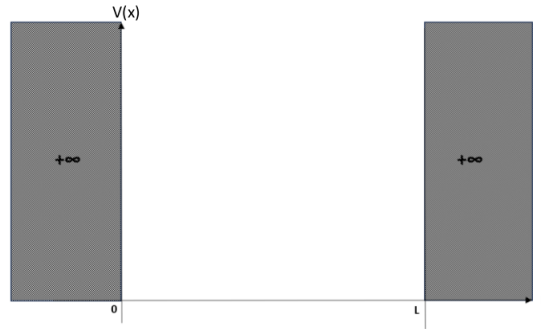


Figure 1: Puits de potentiel infini de largeur L

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

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 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 $\psi(0)$ et $\psi(L)$? Utiliser ces conditions pour déterminer certaines des constantes de la solution générale $\psi(x)$.

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

D'après (2), $\psi(x = L) = A \sin(kL) = 0 \implies kL = n\pi$ car A différent de 0 mais sin peut être nul $\implies k = \frac{n\pi}{L}$, 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 $\psi(x)$.

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

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

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

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

On revient à l'équation de Schrodinger :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(-\frac{n^2\pi^2}{L^2} \right) \psi(x) = E\psi(x) \implies E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2} \times n^2. \quad n \text{ peut être qualifié de nombre quantique associé au niveau d'énergie.}$$

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 :

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

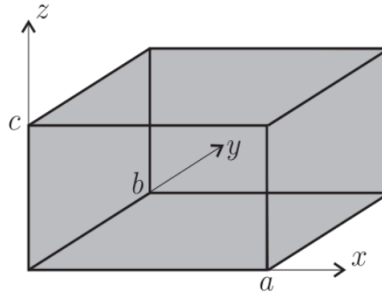


Figure 2: Boîte quantique de dimensions $a \times b \times c$

1. Rappeler l'équation de Schrödinger appliquée à 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 :

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

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

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

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

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

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 $E_{n,p,q} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} (n^2 + p^2 + q^2)$.
 E_f est l'énergie de l'état fondamentale (énergie minimale) correspondant à Σn_i^2 minimale, c'est-à-dire $n=p=q=1$:

$$E_f = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} (1^2 + 1^2 + 1^2) = \frac{3}{2} \times \frac{\hbar^2 \pi^2}{ma^2}$$

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 .

$$E_n = \frac{3}{2} \frac{\hbar^2 \pi^2}{ma^2} \times \Sigma n_i^2. \text{ Ex:}$$

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

$$\begin{aligned}\left(A^2 \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)\right)^2 &= A^2 \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \text{ or on sait que } \sin^2(x) = \frac{1 - \cos(2x)}{2} \\ &= A^2 \frac{1 - \cos\left(2 \times \frac{n\pi}{L}x\right)}{2} \\ &= \frac{A^2}{2} \left(1 - \cos\left(\frac{2n\pi}{L}x\right)\right)\end{aligned}$$

Développement complet de cette intégrale: on sait que $\int \cos(ax)dx = \frac{1}{a} \sin(ax) + C$ (on prendra $C=0$)

$$\begin{aligned}\int_0^L \cos\left(\frac{2n\pi}{L}x\right) dx &= \left[\frac{1}{\frac{2n\pi}{L}} \sin\left(\frac{2n\pi}{L}x\right)\right]_0^L \\ &= \frac{1}{\frac{2n\pi}{L}} \left(\sin\left(\frac{2n\pi L}{L}\right) - \sin\left(\frac{2n\pi 0}{L}\right)\right) \\ &= \frac{1}{\frac{2n\pi}{L}} (\sin(2n\pi) - \sin(0)) \text{ or } \sin \text{ est } \pi\text{-périodique donc} \\ &= \frac{1}{\frac{2n\pi}{L}} (0 - 0) \\ &= 0\end{aligned}$$

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