Séance 6 :

vendredi 15 avril 2022 21:40

1. PUITS CARRÉ INFINI EN 1 DIMENSION

   Le potentiel du puits carré infini de longueur L est décrit de la façon suivante :

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 \leq x \leq L \\ +\infty & x > L \end{cases}$$

   (a) Écrire l'équation de Schrödinger stationnaire pour une particule de masse m évoluant dans ce potentiel et en déduire les fonctions propres de l'Hamiltonien.

   (b) En déduire également les énergies propres.

2. PUITS CARRÉ INFINI EN 3 DIMENSIONS

   Considérons maintenant le potentiel du puits carré infini en 3 dimensions. On peut imaginer cela comme une particule confinée dans une boîte dure, parallélépipède rectangle, de côté L_1, L_2 et L_3. Alors,

$$V^{(3)}(x,y,z) = V_1(x) + V_2(y) + V_3(z)$$

   avec

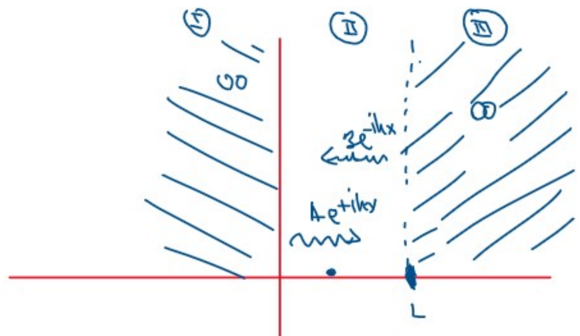
$$V_i(x_i) = \begin{cases} 0 & \text{si } 0 \leq x_i \leq L_i \\ +\infty & \text{ailleurs} \end{cases}$$

   (a) Comme précédemment, écrire l'équation de Schrödinger stationnaire pour une particule de masse m évoluant dans ce potentiel et en déduire les fonctions propres de l'Hamiltonien en supposant que la solution est factorisée sous la forme $\psi(x,y,z) = \psi_1(x)\psi_2(y)\psi_3(z)$.

   (b) En déduire également les énergies propres.

   (c) Approximer le nombre d'états quantiques indépendants à l'intérieur de la boîte possédant une énergie inférieure à une certaine valeur E_0.

1)



a) $\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right)\psi(x) = E\cdot\psi(x)$

(I) : $\rho(x) = 0 = |\psi|^2 \Rightarrow |\psi| = 0 \Rightarrow \psi(x) = 0$

(la particule n'existe pas ds (I))

(II) $V(x) = 0$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\psi''(x) = E\,\psi(x)$$

$$\psi''(x) + \frac{2mE}{\hbar^2}\cdot\psi(x) = 0$$

$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$: vect. d'onde. ↳ $\psi'' + k^2\psi(x) = 0$.

$$\psi_{II}(x) = A\cos(x) + B\sin(x)$$

$$\| \psi_{II}(x) = A'e^{ikx} + B'e^{-ikx} \|$$

o.i , o.r .

* $\psi_{I}(0) = \psi_{II}(0)$: raccordement au pt $x = 0$. (condit° 1)

$0 = A + B \Rightarrow A = -B$.

$$\psi_{II}(x) = A\cdot\left(e^{ikx} - e^{-ikx}\right)$$

$$\psi_{II}(x) = 2iA\cdot\sin(kx)$$

(b) les énergies propres:

$$\psi_{II}(L) = \psi_{III}(L)$$

$$2iA\sin(kL) = 0$$

$$\sin(kL) = 0$$

$$kL = n\pi$$

$$\| k_n = \frac{n\pi}{L} \|$$

$$\| k_n = \frac{n\pi}{L} \|$$

$$E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2$$

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \cdot \underline{n^2} \qquad n \in \mathbb{N}^*$$

$*$ $n = 1$: $\underline{\underline{E_1}} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}$ $\qquad \| E_n = \underline{E_1} \cdot n^2 \|$

$$\psi_{II}(x) = \overbrace{2iA}^{A'} \sin\left(\frac{n\pi}{L} \cdot x\right).$$

$$\psi_{II}(x) = A' \cdot \sin\left(\frac{n\pi}{L} \cdot x\right)$$

$*$ condition de normalisation:

$$\int_{\text{univers}} |\psi|^2 \, dv = 1$$ (probabilité de trouver la particule dans l'univers égale à 1).

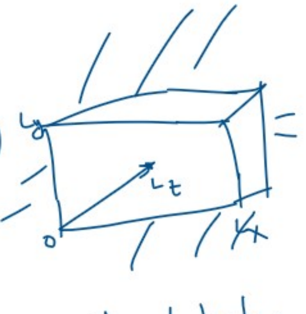
$$\int_0^L |\psi|^2 \cdot dx = 1 \Rightarrow |A'|^2 \int \sin^2\left(\frac{n\pi}{L} x\right) dx = 1$$

$$|A'|^2 = \frac{1}{\int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi}{L} x\right) dx} = \frac{1}{\int_0^L \frac{1 - \cos\left(\frac{2n\pi}{L} \cdot x\right)}{2} dx}$$

$$|A|^2 = \frac{1}{\frac{L}{2}} \Rightarrow |A| = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

$$\| \psi_{II}(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cdot \sin\left(\frac{n\pi}{L} \cdot x\right) \| \qquad 0 \leq x \leq L$$

2.) Puits carré à 3D :



$$V(x, y, z) = V_1(x) + V_2(y) + V_3(z)$$

$$V_i(x_i) = \begin{cases} 0 & \text{si } 0 \leq x_i \leq L_i \\ +\infty & \text{ailleurs} \end{cases}$$

$$V = L_x \cdot L_y \cdot L_z.$$

a) $\underline{\underline{Eq}}$:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(x,y,z)\right] \cdot \psi(x,y,z) = E \cdot \psi(x,y,z).$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\Delta + V^3(x,y,z)\right]\cdot\psi(x,y,z) = E\cdot\psi(x,y,z).$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + V_x + V_y + V_z\right)\psi = E\cdot\psi.$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,y,z) + V(x)\,\psi(x,y,z)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\partial^2}{\partial y^2}\psi(x,y,z) + V(y)\,\psi(x,y,z)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\partial^2}{\partial z^2}\psi(x,y,z) + V(z)\,\psi(x,y,z)$$

$$= E\cdot\psi(x,y,z)$$

on suppose que: $\psi(x,y,z) = \Phi(x)\cdot\Phi(y)\cdot\Phi(z)$

$$E = E_x + E_y + E_z.$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\Phi(y)\,\Phi(z)\cdot\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Phi(x) - \frac{\hbar^2}{2m}\cdot\Phi(x)\,\Phi(z)\,\frac{\partial^2}{\partial y^2}\Phi(y)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\Phi(x)\,\Phi(y)\cdot\frac{\partial^2}{\partial z^2}\Phi(z) = (E_x+E_y+E_z)\,\Phi(x)\,\Phi(y)\,\Phi(z)$$

$\div\ \Phi(x)\cdot\Phi(y)\cdot\Phi(z)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{1}{\phi(x)}\cdot\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Phi(x) - \frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{1}{\phi(y)}\cdot\frac{\partial^2}{\partial y^2}\phi(y)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{1}{\phi(z)}\cdot\frac{\partial^2}{\partial z^2}\phi(z) = E = E_x + E_y + E_z.$$

$$\begin{cases} -\dfrac{\hbar^2}{2m}\cdot\dfrac{1}{\phi(x)}\dfrac{\partial^2}{\partial x^2}\Phi(x) = E_x. \\[2ex] -\dfrac{\hbar^2}{2m}\,\dfrac{1}{\phi(y)}\,\dfrac{\partial^2}{\partial y^2}\phi(y) = E_y. \\[2ex] -\dfrac{\hbar^2}{2m}\,\dfrac{1}{\phi(z)}\cdot\dfrac{\partial^2}{\partial z^2}\phi(z) = E_z \end{cases}$$

$$\begin{cases} -\dfrac{\hbar^2}{2m}\,\dfrac{\partial^2}{\partial x^2}\phi(x) = E_x\phi(x) & 0 \leq x \leq L_x \\[2ex] -\dfrac{\hbar^2}{2m}\,\dfrac{\partial^2}{\partial y^2}\phi(y) = E_y\phi(y) & 0 \leq y \leq L_y \\[2ex] -\dfrac{\hbar^2}{2m}\cdot\dfrac{\partial^2}{\partial z^2}\phi(z) = E_z\phi(z). & 0 \leq z \leq L_z \end{cases}$$

$$\Phi(x) = \sqrt{\frac{2}{L_x}}\cdot\sin\left(\frac{n\pi}{L_x}\cdot x\right)$$

Problème I (5 points) : Puits de potentiel infini

Une particule M de masse m et d'énergie $E > 0$ est assujettie à se déplacer librement sur le segment $\left[-\frac{a}{2}, \frac{a}{2}\right]$ de l'axe $(x'x)$. L'énergie potentielle de la particule est de la forme :

$$V(x) = \begin{cases} 0 & ; \text{ pour } -\frac{a}{2} \le x \le \frac{a}{2} \\ +\infty & ; \text{ pour } x < -\frac{a}{2} \text{ et } x > \frac{a}{2} \end{cases}$$

Notons $\psi(x)$ la fonction d'onde de la particule.

1. Donner l'expression de $\psi(x)$ dans les deux régions $\left]-\infty, -\frac{a}{2}\right[$ et $\left]\frac{a}{2}, +\infty\right[$.

2. Donner l'expression de $\psi(x)$ dans la région $\left[-\frac{a}{2}, \frac{a}{2}\right]$. On posera : $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E$.

3. En tenant compte de la symétrie du potentiel $V(x)$, réécrire l'expression de $\psi(x)$ dans la région $\left[-\frac{a}{2}, \frac{a}{2}\right]$ en explicitant les fonctions d'onde **paire** $\psi_P(x)$ et **impaire** $\psi_I(x)$.

4. Écrire l'équation de **continuité** de $\psi(x)$ au point $x = \frac{a}{2}$ et montrer que le vecteur d'onde k et l'énergie E sont quantifiés. On introduira un entier naturel n non nul ($n \in \mathbb{N}^*$) distinguant les différentes valeurs de k et de E.

$$\Phi(y) = \sqrt{\frac{2}{L_y}} \sin\left(\frac{n\pi}{L_y} \cdot y\right)$$

$$\Phi(z) = \sqrt{\frac{2}{L_z}} \cdot \sin\left(\frac{n\pi}{L_z} \cdot z\right)$$

$$\psi_{n_x n_y n_z} = \phi(x)\,\phi(y)\,\phi(z) = \sqrt{\frac{8}{L_x L_y L_z}} \sin\left(\frac{n_x\pi}{L_x} x\right) \cdot \sin\left(\frac{n_y\pi}{L_y} y\right)$$

$$\sin\left(\frac{n_z\pi}{L_z} \cdot z\right)$$

$$E = E_{n_x} + E_{n_y} + E_{n_z}$$

$$= \frac{\hbar^2\pi^2}{2m L_x^2} n_x^2 + \frac{\hbar^2\pi^2}{2m L_y^2} n_y^2 + \frac{\hbar^2\pi^2}{2m L_z^2} \cdot n_z^2$$

$$L_x = L_y = L_z = L$$

$$\rightarrow E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m L^2} \{ n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 \}.$$

1	2	1
2	1	1
1	1	2

E_{111} : niveau fondamental.

$1\ 2\ 1 \rightarrow \psi_{121} = \psi_{112} = \psi_{211}$

3 fois dégénéré.

4. Ecrire l'équation de **continuité** de $\psi(x)$ au point $x = \frac{a}{2}$ et montrer que le vecteur d'onde k et l'énergie E sont quantifiés. On introduira un entier naturel n non nul $(n \in \mathbb{N}^*)$ distinguant les différentes valeurs de k et de E.

5. Donner les fonctions d'ondes **normalisées** $\psi_n(x)$.