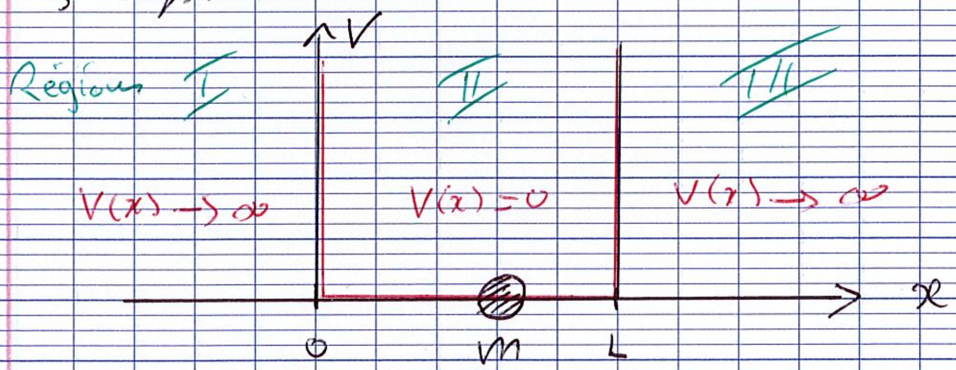
TD IV La Particule dans la boîte

→ Un premier système quantique simple

→ Objectifs :

- Application des postulats
- Montrer l'origine de la quantification des niveaux d'énergie dès qu'une particule est confinée dans une région de l'espace

→ Système :



Méthode

1) Ecrire l'énergie classique totale $E = T + V$
2) En déduire l'opérateur énergie $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$
3) Résoudre l'équation de Schrödinger $\hat{H}\Psi = E\Psi$
4) Etudier les solutions Ψ_n, E_n

TD IV - La Particule dans la boîte

* Equation de Schrödinger ?

système $\Leftrightarrow$ masse m dans un potentiel V

$$H = T + V = \frac{p_x^2}{2m} + V \Rightarrow \boxed{\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V}$$

soit $$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V\psi = E\psi$$

$$\Leftrightarrow \boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + (V-E)\psi = 0}$$

Régions I et III : $V \to +\infty \Rightarrow \psi = \frac{1}{\infty}\frac{d^2\psi}{dx^2} \Rightarrow \psi = 0$

$\Rightarrow$ la probabilité de présence est nulle dans ces régions

Région II : $V = 0$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \Leftrightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} + \alpha^2\psi = 0$$

avec $\alpha^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

* Fonction proposée : $\psi = A\sin(\alpha x) + B\cos(\alpha x)$

$\rightarrow$ vérifier que $\hat{H}\psi = E\psi$

$$\Leftrightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} + \alpha^2\psi = 0$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{d}{dx}\left(A\alpha\cos(\alpha x) - B\alpha\sin(\alpha x)\right)$$

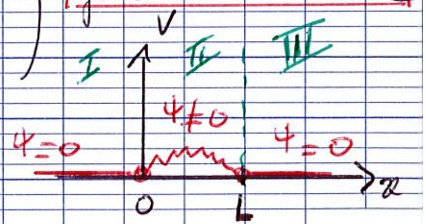
$$= -A\alpha^2\sin(\alpha x) - B\alpha^2\cos(\alpha x)$$

$$= -\alpha^2\psi \quad \text{CQFD}$$

* Conditions aux limites

régions I et III, $\psi(x) = 0$

$\Rightarrow$ région II : $\begin{cases} \psi(x \to 0^+) = 0 \\ \psi(x \to L^-) = 0 \end{cases}$ $\Bigg\}$ ψ fonction continue



$$\psi(x) = A\sin(\alpha x) + B\cos(\alpha x)$$

$$\psi(0) = 0 \Rightarrow 0 + B = 0$$
$$\psi(L) = 0 \Rightarrow A\sin(\alpha L) = 0$$

"Les conditions aux limites imposent que seulement certaines fonctions sont acceptables $\Leftrightarrow$ quantification"

$\Rightarrow \alpha L = n\pi$ | n entier non nul

$\Leftrightarrow \alpha = \frac{n\pi}{L}$ | sinon $\psi_0 = 0$

Donc dans la région II : $\boxed{\psi_n(x) = A\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)}$

$$\alpha = \frac{n\pi}{L} \Rightarrow \alpha^2 = \frac{n^2\pi^2}{L^2} = \frac{2mE}{\hbar^2} \Rightarrow \boxed{E_n = \frac{n^2 h^2}{8mL^2}}$$

* Détermination de A → condition de normalisation

$$\int_{\text{espace}} \psi^*(x)\,\psi(x)\,dx = 1 = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x)\,\psi(x)\,dx = 1$$

$$\Rightarrow \int_0^L \psi^*(x)\,\psi(x)\,dx = 1 \quad \text{car } \psi = 0 \text{ entre } \begin{cases}]-\infty, 0] \\ \text{et} \\ [L, +\infty[\end{cases}$$

Soit $\int_0^L A^2\sin^2(\alpha x)\,dx = 1$

$$\Leftrightarrow A^2\int_0^L \frac{1-\cos(2\alpha x)}{2}\,dx = 1$$

$$\Leftrightarrow A^2\left[\frac{x}{2} - \frac{1}{4\alpha}\sin(2\alpha x)\right]_0^L = 1 \quad \text{avec } \alpha = n\pi/L$$

$$\Leftrightarrow A^2\left[\frac{x}{2} - \frac{L}{4n\pi}\sin\left(\frac{2n\pi}{L}x\right)\right]_0^L = 1$$

$$\Leftrightarrow A^2\left[\left(\frac{L}{2} - 0\right) - (0 - 0)\right] = 1 \Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

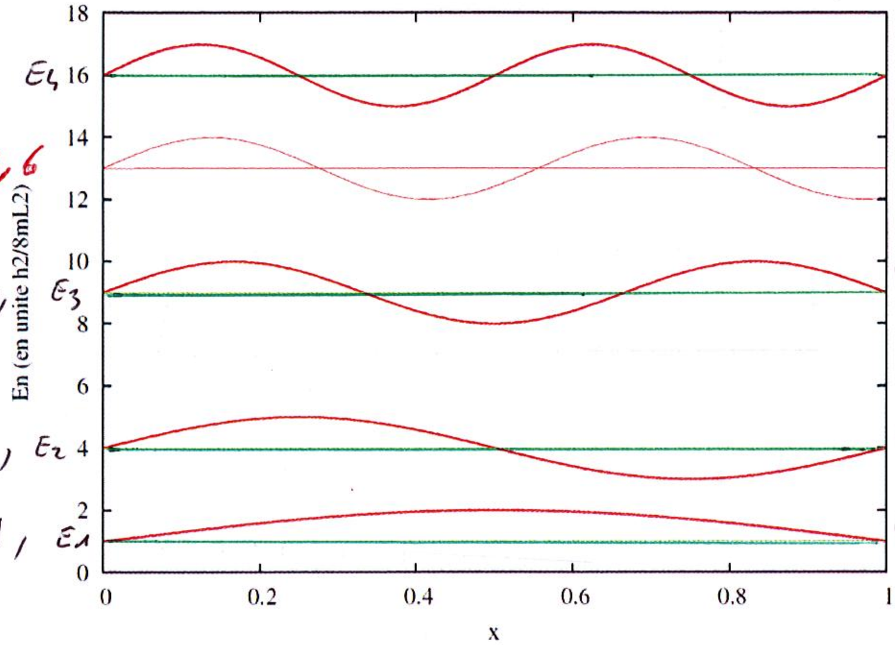
Soit $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$ avec $n = 1, 2, 3 \ldots$

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

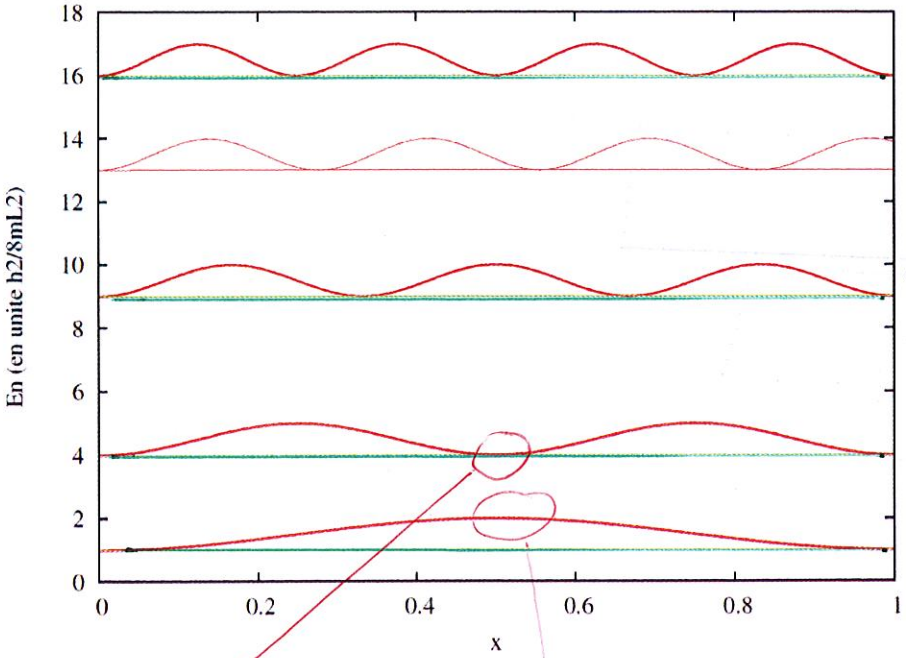
Particule dans une boîte à 1 dimension

Courbes à commenter $(L = 1)$ en u.a.

$\psi_n(x)$



$\psi_n^2(x)$



Probabilité de présence nulle en L/2 dans n=2
⇒ point nodal
(impossible en mécanique classique)

Probabilité de présence maximale dans l'état n=1

* Plus petite valeur de $n = 1$

$n = 1 \quad E_1 = h^2/8mL^2$
$n = 2 \quad E_2 = 4h^2/8mL^2$
$n = 3 \quad E_3 = 9h^2/8mL^2$
$n = 4 \quad E_4 = 16h^2/8mL^2$

$\rightarrow$ { E minimale > 0
ZPE : "Zero Point Energy"

$\Leftrightarrow$ Principe d'incertitude d'Heisenberg
$\Delta p \Delta r \geq \hbar/2$
or si $p = 0$, r et p sont fixés !

Remarques complémentaires

* $\Psi_n(x)$ est fonction propre de l'équation de Schrödinger et E_n sont les valeurs propres.

$\Leftrightarrow \hat{H}\Psi_n(x) = E_n \Psi_n(x)$ avec $\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$

$$\hat{H}\Psi_n(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi_n(x)}{\partial x^2} = \underbrace{\frac{\hbar^2}{2m}\frac{n^2\pi^2}{L^2}}\Psi_n(x) = E_n\Psi_n(x)$$

$$\left(\text{Et aussi } E_n = \langle E_n \rangle = \int_{esp} \Psi_n^* \hat{H} \Psi_n \, dx\right) \quad E_n = \frac{n^2 h^2}{8mL^2}$$

* Energie totale du système : E_n
$\rightarrow$ cette énergie est uniquement cinétique

$$\Rightarrow \frac{n^2 h^2}{8mL^2} = \frac{p^2}{2m} \Rightarrow (mv)^2 = \frac{n^2 h^2}{4L^2} \Rightarrow \underbrace{\frac{h}{mv}} = \frac{2L}{n}$$

- λ longueur d'onde associée de de Broglie
- multiple de L

* limites macroscopiques $\rightarrow$ { Comportement classique
m et $L \uparrow\uparrow \Rightarrow E_1 \rightarrow 0$
et $\Delta E_{n \rightarrow n+1} = (2n+1)\frac{h^2}{8mL^2} \rightarrow 0$, continuum de niveaux d'énergies.

Généralisation en 2D

Soit à résoudre $\hat{H}\psi(x,y) = E\psi(x,y)$

avec $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)$

Soit $\psi(x,y) = X(x)\,Y(y)$

$$\Rightarrow \quad Y(y)\frac{\partial^2 X(x)}{\partial x^2} + X(x)\frac{\partial^2 Y(y)}{\partial y^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}X(x)Y(y) = 0$$

$$\Leftrightarrow \quad \frac{1}{X(x)}\frac{\partial^2 X(x)}{\partial x^2} + \frac{1}{Y(y)}\frac{\partial^2 Y(y)}{\partial y^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} = 0$$

$$\Rightarrow \begin{cases} X''/X + 2mE_x/\hbar^2 = 0 \\ Y''/Y + 2mE_y/\hbar^2 = 0 \end{cases} \quad \text{avec } E = E_x + E_y$$

On reconnaît les équations 1D

$$\Rightarrow \begin{cases} X(x) = \sqrt{2/L_x}\,\sin(n_x\pi x/L_x), \; E_{x,n_x} = \frac{n_x^2 h^2}{8mL_x^2} \\ Y(y) = \sqrt{2/L_y}\,\sin(n_y\pi y/L_y), \; E_{y,n_y} = \ldots \end{cases}$$

avec L_x et L_y les côtés de la boîte

$n_x, n_y = 1, 2, 3 \ldots$

$$\boxed{\psi_{n_x n_y}(x,y) = \sqrt{\frac{4}{L_x L_y}}\sin\left(\frac{n_x\pi x}{L_x}\right)\sin\left(\frac{n_y\pi y}{L_y}\right)}$$

et $\boxed{E_{n_x n_y} = \frac{h^2}{8m}\left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2}\right)}$

État fondamental $E_{11} = 2h^2/8mL^2$

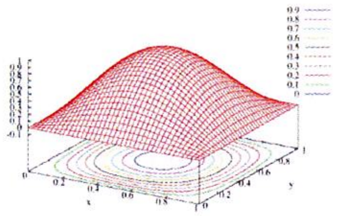
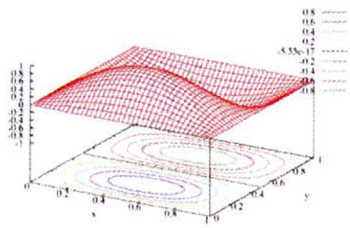
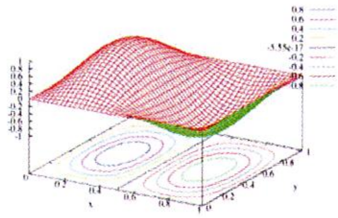
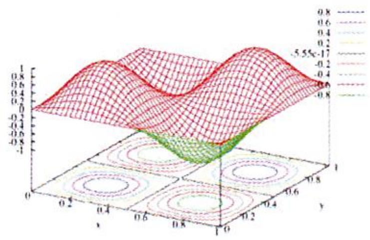
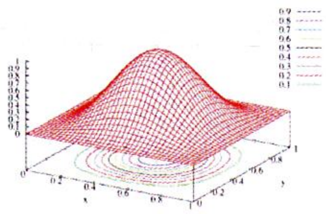
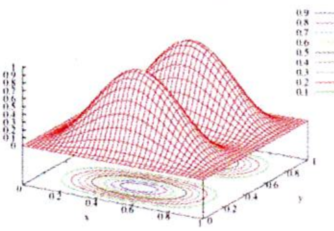
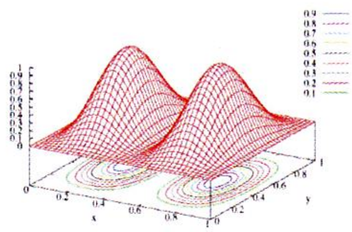
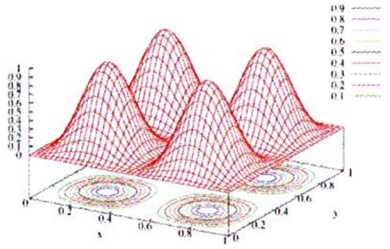
dans une boîte carrée

$L_x = L_y = L$ $\qquad E_{12} = E_{21} = \frac{5h^2}{8mL^2}$ $\quad$ 1er état excité doublement dégénéré

« La dégénérescence est liée à la symétrie »

$$\psi_{n_x,n_y}(x,y) = \sqrt{\frac{2}{L_x}}\sqrt{\frac{2}{L_y}}\sin\left(\frac{n_x\pi x}{L_x}\right)\sin\left(\frac{n_y\pi y}{L_y}\right)$$

Particule dans une boîte à 2 dimensions

Ψ nx = 1 ny = 1	 ψ_{11}	
Ψ nx = 1 ny = 2 et nx = 2 ny = 1	 ψ_{12}	 ψ_{21} rotation de 90°
Ψ nx = 2 ny = 2	 ψ_{22}	
Ψ. Ψ nx = 1 ny = 1	 ψ_{11}^2	
Ψ. Ψ nx = 1 ny = 2 et nx = 2 ny = 1	 ψ_{12}^2	 ψ_{21}^2
Ψ. Ψ nx = 2 ny = 2	 ψ_{22}^2	