MÉCANIQUE QUANTIQUE

Corrigé des TRAVAUX DIRIGÉS Nos. 3 (Durée: 1 h)

Particule dans un puits

Particule dans un puits

On considère une particule de masse m, de fonction d'onde $\psi(x)$ astreinte à se mouvoir dans un puits unidimensionnel infiniment profond, de largeur a, situé entre $x = 0$ et $x = a$.

1. Rappeler l'équation de Schrödinger dépendant du temps en fonction du Hamiltonien H de la particule

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = H\Psi$$

2. En déduire l'équation à laquelle obéissent les fonctions propres de la particule d'énergie E

Si $H\Psi = E\Psi$ (H un opérateur et E un nombre réel) alors $i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = E\Psi$ donc $\Psi(t) = \Psi(t=0)e^{-i\frac{Et}{\hbar}}$ (facteur de Bohr)

3. Que vaut H dans le cas ici considéré ?

ici $H = T+V$ avec T l'opérateur énergie cinétique et V le potentiel qui est uniformément nul dans la zone d'intérêt, donc $H = T = \frac{p^2}{2m}$ avec p l'opérateur impulsion. En représentation x $p = -i\hbar\nabla$ donc finalement $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}$

4. Résoudre alors l'équation du 2, en tenant compte de conditions aux limites physiquement raisonnables. Donner en particulier les fonctions propres $\psi_n(x)$, et les vecteurs d'onde k_n et énergies E_n correspondantes. Représenter graphiquement les niveaux E_n.

Puisque le potentiel est infini à l'extérieur du puits, la fonction d'onde de la particule y est nulle. (elle ne peut y aller, même en tenant compte de l'effet tunnel). En particulier, $\Psi = 0$ aux bords du puits, en $x = 0$ et $x = a$.

La solution de

$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi}{dx^2} = E\Psi$ est évidemment $\Psi = A\sin(kx+\phi)$ avec A, k, ϕ à déterminer (on prend une forme en sinus car la fonction d'onde est nulle à l'origine, donc $\phi = 0$). On a le droit de prendre une fonction d'onde réelle car on s'intéresse à une fonction propre, qui représente un état stationnaire, ayant uniquement un facteur de phase global.

Exercice complémentaire : montrer qu'une fonction d'onde en $\Psi = \psi(x)e^{i\phi(x)}$ avec ψ réel est instationnaire si $d\phi/dx$ n'est pas nul.

On détermine k en substituant la forme de Ψ dans l'équation de Schrödinger et l'on trouve

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

De plus Ψ *est nul en* $x = a$ *donc*

$$ka = n\pi$$

avec n entier et on trouve des vecteurs d'onde $k_n = \frac{n\pi}{a}$ *quantifiés, de même que les énergies* $E_n = \frac{k_n^2 \hbar^2}{2m} = \frac{n^2 h}{8ma^2}$.
Ces niveaux forment donc un escalier à marches inégales !

5. Normaliser les $\psi_n(x)$.

   On sait que

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

   donc comme Ψ *est nulle hors du puits on trouve* $A = \sqrt{\frac{2}{a}}$

6. Donner l'allure des premières fonctions propres ($n = 0, 1, 2, 3 \cdots$) et des densités de probabilité $\rho(x)_n$ correspondantes. $n = 0$ est il raisonnable ?

   Finalement $\Psi = \sqrt{2}a \sin(\frac{n\pi}{a}x)$ *avec n entier. Les fonctions propres sont des arcs de sinusoïde, comme un corde de guitare pincée aux deux extrémités.* $n = 0$ *correspondrait à une fonction uniformément nulle et donc à une probabilité de trouver la particule au total nulle, ce qui est absurde.*

7. Généraliser dans le cas d'un puits bi, puis tridimensionnel

   On généralise aisément, comme en électromagnétisme, car l'équation de Schrödinger étant linéaire on peut écrire $\Psi(x,y,z) = \psi_x(x)\psi_y(y)\psi_z(z)$ *avec chacune des fonctions* $\psi_{x,y,z}$ *satisfaisant à l'équation unidimensionnelle dans un puits.*

   Finalement $E = \frac{h}{8ma^2}(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$ *avec* n_x, n_y, n_z *entiers.*