Exercices 3

Exercice 3.1

Une particule est confinée dans une boîte linéaire de longueur L entourée de parois de potentiel infini. L'état fondamental de ce système est décrit par la fonction d'onde suivante :

$$\Psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \times sin\ sin\ \left(\frac{\pi x}{L}\right)$$

a) Quelle est la probabilité de trouver la particule à une position x donnée ?

b) A quelle position se trouve la densité de probabilité maximale ?

c) Quelle est la probabilité totale de trouver la particule dans la boîte ?

d) Si L = 10 nm, quelle est la probabilité que la particule soit comprise entre 4:95 et 5:05 nm?

Note : L'exercice 3.1 sera résolu au tableau lors de la séance d'exercices de ce vendredi 26 septembre 2025.

a) Comme nous l'avons vu, la densité de probabilité de trouver la particule à une position x donnée est donnée par le carré de la fonction d'onde :

$$\Psi_1(x)^2 = \left(\sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\pi \frac{x}{L}\right)\right)^2 = \frac{2}{L} \sin^2\left(\pi \frac{x}{L}\right)$$

Et la probabilité elle-même est calculée en intégrant la densité de probabilité entre deux points. Par conséquent, si nous calculons la probabilité de trouver la particule à une seule position spécifique x, les bornes de l'intégrale sont les mêmes :

$$\int_x^x \Psi_1(x)^2 dx$$

La probabilité de trouver la particule à une position particulière x est égale à zéro.

b) La position avec la plus grande probabilité correspond au maximum des fonctions de densité de probabilité $\Psi_1(x)^2$. La représentation graphique de la fonction d'onde montre un pic au milieu de la boîte. ($x = \frac{L}{2}$), sinon elle peut être calculée. Lorsque $\Psi^2{}_1$ est à son maximum, sa dérivée première doit être égale à zéro :

$$\begin{aligned} 0 = \Psi_1^2(x)' &= \left[\frac{2}{L}\sin^2\left(\frac{\pi x}{L}\right)\right]' \\ &= \left[\frac{1}{L} - \frac{1}{L}\cos\left(\frac{2\pi x}{L}\right)\right]' \\ &= \frac{1}{L}\sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right) \cdot \frac{2\pi}{L} \end{aligned}$$, en utilisant, $\sin^2 \alpha = \frac{1-\cos(2\alpha)}{2}$

Puisque $\sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right) = 0$, alors $\frac{2\pi x}{L} = 0 + k\pi$ avec k un entier positif. De plus, puisque $x \in [0, L]$, $x = \frac{L}{2}$.

$x = 0$ et $x = L$ donnent également une dérivée première égale à zéro, mais ils correspondent à des mima et non à des maxima. Ceci peut être facilement vérifié en calculant la dérivée seconde de$\Psi_1^2(x)$:

$$\Psi_1^2(x)'' = \left(\frac{2\pi}{L^2}\sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right)\right)' = \frac{4\pi^2}{L^3}\cos\left(\frac{2\pi x}{L}\right)$$

Par conséquent, lorsque x = 0 ou x = L, la dérivée seconde est positive alors qu'elle est négative pour x = L/2. Une dérivée seconde donnant des valeurs négatives correspond à un maximum.

c) La particule est confinée dans la boîte, donc la probabilité totale de trouver la particule à l'intérieur de la boîte doit être de 1, ce qui peut être vérifié par intégration Ψ_1^2 de 0 to L :

$$\begin{aligned}\int_0^L \Psi_1^2(x)dx &= \int_0^L \tfrac{2}{L}\sin^2\left(\pi\tfrac{x}{L}\right)dx \\ &= \tfrac{2}{L}\int_0^L \tfrac{1-\cos\left(2\pi\frac{x}{L}\right)}{2}dx \\ &= \tfrac{1}{L}\int_0^L dx - \tfrac{1}{L}\int_0^L \cos\left(2\pi\tfrac{x}{L}\right)dx \\ &= \tfrac{1}{L}(L-0) - \tfrac{1}{L}\tfrac{L}{2\pi}\left[\sin\left(2\pi\tfrac{x}{L}\right)\right]_0^L \\ &= 1 - \tfrac{1}{2\pi}\cdot(0-0) = 1\end{aligned}$$

, en utilisant$\sin^2\alpha = \frac{1-\cos(2\alpha)}{2}$

d) En suivant la même procédure, avec L = 10, on trouve :

$$\begin{aligned}P(4.95 \le x \le 5.05) &= \int_{4.95}^{5.05}\Psi^2(x)dx = \ldots \\ &= \tfrac{1}{10}(5.05-4.95) - \tfrac{1}{2\pi}\left\{\sin\left(2\pi\tfrac{5.05}{10}\right) - \sin\left(2\pi\tfrac{4.95}{10}\right)\right\} \cong 0.02\end{aligned}$$

La particule a donc une probabilité d'environ 2% de se trouver entre 4.95 et 5.05 nm.

Exercice 3.2

L'énergie totale de la particule dans la boîte peut être calculée comme suit

$$E_{tot} = E_{cin} + E_{pot},$$

où l'énergie cinétique est donnée par

$$E_{cin} = \frac{1}{2}mv^2.$$

Écrivez une expression pour l'énergie totale de la particule dans la boîte, en utilisant la relation de Broglie ($p = mv = \frac{h}{\lambda}$) et le fait que la longueur d'onde doit satisfaire aux conditions suivantes $\lambda = \frac{2L}{n}$. Quelle est la principale implication de cette équation ?

En suivant l'expression de l'énergie totale et en la substituant, on obtient :

$$E_{tot} = \frac{1}{2}mv^2 + 0,$$

puisque $E_{pot} = 0$ à l'intérieur de la boîte.

Enfin, en substituant la quantité de mouvement, nous obtenons :

$$E_{tot} = \frac{1}{2}\frac{(mv)^2}{m}$$

$$E_{tot} = \frac{1}{2m}p^2 = \frac{1}{2m}\frac{h^2}{\lambda^2} = \frac{1}{2m}\frac{h^2n^2}{(2L)^2} = \frac{n^2h^2}{8mL^2}.$$

Exercice 3.3

Utilisez le model de la particule dans la boite pour un atome d'hydrogène (avec une longueur de boite de 150 pm) pour calculer la longueur d'onde d'une radiation correspondant à la transition d'un électron depuis le niveau d'énergie n=5 au niveau d'énergie n=4. Répétez le même calcul pour une transition du niveau n=4 au niveau n=3.

En utilisant la formule obtenue à l'exercice précédent on obtient pour la différence en énergie correspondant à une transition d'un niveau initial n_i à un niveau final n_f, l'équation suivante :

$$\Delta E(n_i, n_f) = (n_f^2 - n_i^2)\frac{h^2}{8mL^2}.$$

Enfin, pour convertir l'énergie en longueur d'onde on utilise :

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} \Leftrightarrow \lambda = \frac{hc}{E}$$

Pour l'atome d'hydrogène, on utilise :

$$m_e = 9.1 * 10^{-31} \text{ [kg]}$$

$$L = 150 \text{ [pm]}.$$

En substituant les valeurs pour n_i et n_f on obtient :

pour $n_i = 5$ and $n_f = 4$, $\Delta E = \frac{(25-16)(6.626*10^{-34})^2}{8*9.1*10^{-31}*(150*10^{-12})^2} = 2.41 * 10^{-17}$ [J]

$$\lambda_{5,4} = \frac{6.626*10^{-34}*3*10^8}{\Delta E} = 8.24 \text{ [nm]},$$

et

pour $n_i = 4$ and $n_f = 3$, $\Delta E = \frac{(16-9)(6.626*10^{-34})^2}{8*9.1*10^{-31}*(150*10^{-12})^2} = 1.88 * 10^{-17}$ [J]

$$\lambda_{4,3} = 10.59 \text{ [nm]}.$$

Exercice 3.4

Les niveaux d'énergies d'une particule de masse m dans une boite de longueur L sont donnés par la formule suivante : $\frac{(n_1^2+n_2^2)h^2}{8mL^2}$.

Est-ce que certains de ces niveaux ont la même énergie ?

Si oui, trouver les valeurs de n_1 et n_2 pour les trois premiers cas de figure (par ordre croissant d'énergie).

Puisque les niveaux d'énergies sont maintenant définis par deux nombres quantiques principaux, n_1 et n_2, afin d'obtenir des niveaux de même énergie E, il faut satisfaire :

$$(n_1^2 + n_2^2)\frac{h^2}{8mL^2} = E = (n_1'^2 + n_2'^2)\frac{h^2}{8mL^2}$$
$$\Leftrightarrow \ (n_1^2 + n_2^2) = (n_1'^2 + n_2'^2).$$

Intuitivement, on remarque que le seul moyen de satisfaire cette équation est de permuter les nombres quantiques principaux pour préserver la somme des carrés, puisque n_1 and $n_2 > 0$.

Mathématiquement il est possible de résoudre cette équation en la découplant et en créant le système d'équation linéaire suivant :

$$(n_1^2 + n_2^2) = (n_1'^2 + n_2'^2) \Leftrightarrow \begin{cases} n_1^2 = n_2'^2 \\ n_2^2 = n_1'^2 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} n_1 & = n_2' \\ n_2 & = n_1' \end{cases},$$

avec $n_1, n_2, n_1', n_2' \in N^+$.

Ainsi, les trois premiers cas sont :

$$E_1 = E(1,2) = E(2,1)$$
$$E_2 = E(1,3) = E(3,1)$$
$$E_3 = E(2,3) = E(3,2)$$

Exercice 3.5

Référez-vous à l'exercice précédent. Si l'un des côtés de la boite est deux fois plus grand que l'autre, les niveaux d'énergies sont donnés par :

$$\left(\frac{n_1^2}{L_1^2} + \frac{n_2^2}{L_2^2}\right) \cdot \frac{h^2}{8m},$$

avec $L_2 = 2L_1$.

Certains de ces niveaux ont-ils la même énergie ?

Si oui, trouver les valeurs des nombres quantiques principaux n_1 et n_2 les deux niveaux d'énergies les plus bas ayant des énergies identiques.

En utilisant les informations fournies dans l'énoncé, on trouve pour l'énergie totale l'expression suivante :

$$E(n_1, n_2) = \left(\frac{{n_1}^2}{{L_1}^2} + \frac{{n_2}^2}{(2L_1)^2}\right)\frac{h^2}{8m} = \frac{4{n_1}^2 + {n_2}^2}{4{L_1}^2}\frac{h^2}{8m}$$
$$= (4{n_1}^2 + {n_2}^2)\frac{h^2}{32 \cdot m \cdot {L_1}^2}.$$

En utilisant la même méthodologie qu'à l'exercice précédent, il est possible de découpler cette équation en un système d'équations linéaires, comme ceci :

$$E(n_1, n_2) = E(n'_1, n'_2)$$
$$\Leftrightarrow \ 4{n_1}^2 + {n_2}^2 = 4{n'_1}^2 + {n'_2}^2$$

$$\Leftrightarrow \begin{cases} 4n_1^2 = {n_2'}^2 \\ n_2^2 = 4{n_1'}^2 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} 2n_1 & = n_2' \\ n_2 & = 2n_1' \end{cases},$$

avec $n_1, n_2, n_1', n_2' \in N^+$.

Les deux niveaux les plus bas ayant des énergies identiques sont :

$$E(1,4) = E(2,2)$$
$$E(1,6) = E(3,2).$$