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 :

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

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 27 septembre 2024.

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:

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

$x = 0$ and $x = L$ 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

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

où l'énergie cinétique est donnée par

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

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:

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

depuis $E_{\text{pot}} = 0$ à l'intérieur de la boîte.

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

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

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

Exercise 3.3

Vrai ou faux ?

a) L'énergie de l'état fondamental d'une particule dans une boîte (PDB) est zéro.

b) Les niveaux d'énergie de la PDB sont équidistants.

c) Augmenter l'énergie du PDB à l'état stable équivaut à augmenter le nombre de nœuds dans la fonction d'onde.

d) Toutes les solutions de l'équation de Schrödinger indépendante du temps pour le PDB sont des fonctions d'onde stationnaires autorisées.

e) La transition du PDB qui absorbe le photon de plus grande longueur d'onde se fait du niveau n = 1 au niveau n = 2.

a) Faux : l'énergie d'une particule dans une boîte unidimensionnelle est décrite par $E\ (n) = \frac{h^2n^2}{8mL^2}$. L'état fondamental correspond à n = 1 et son énergie est supérieure à zéro. n = 0 n'est pas une solution pour la particule dans une boîte.
b) Faux. Ils sont de plus en plus éloignés les uns des autres lorsque l'énergie augmente, car ils sont proportionnels à n^2.
c) Vrai. La fonction d'onde $\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \times \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$ a n - 1 nœuds.
d) Vrai. L'équation de Schrödinger indépendante du temps ($\hat{H}\Psi = E\Psi$) décrit tous les états stationnaires eprmis caractérisés par une valeur propre (E) et une fonction propre (Ψ).
e) Vrai. $\Delta E \propto n_2^2 - n_1^2$ Ainsi, la plus petite énergie possible (correspondant à la plus grande longueur d'onde possible) pour une transition de n_1 à n_2 correspond à la première transition ($n_1 = 1$ and $n_2 = 2$).

Exercise 3.4

Le concept de quantification de l'énergie est à la base de la mécanique quantique. Dans les systèmes atomiques, les électrons ne peuvent occuper que des niveaux d'énergie spécifiques et quantifiés. Toutefois, lorsqu'un photon dont l'énergie est supérieure à la différence entre deux niveaux d'énergie interagit avec un atome, l'électron peut passer à un niveau d'énergie supérieur et l'énergie excédentaire devient l'énergie cinétique de l'électron.

Étant donné que : Les niveaux d'énergie de l'atome d'hydrogène sont décrits par la formule :

$$E_n = -\frac{13.6\ eV}{n^2}$$

a) Calculer l'énergie des deux premiers niveaux d'énergie (n=1 et n=2) de l'atome d'hydrogène.

b) Si l'électron de l'atome d'hydrogène absorbe un photon d'une énergie de 12 eV alors qu'il se trouve dans l'état fondamental (n=1), à quel niveau d'énergie, le cas échéant, l'électron passera-t-il ? Calculez l'énergie cinétique acquise par l'électron en raison de l'énergie excédentaire du photon.

c) Sur la base de vos résultats, discutez des implications pour les systèmes atomiques lorsqu'ils interagissent avec des photons de haute énergie.

a) En utilisant la formule fournie :
For n=1: E_1=−13.6 eV
For n=2: E_2=−3.4 eV

~~b) L'énergie nécessaire pour passer de n=1 à n=2: ΔE=E_2−E_1=10.2 eV~~

~~Énergie du photon donnée = 12 eV~~

~~Excès d'énergie qui se transforme en énergie cinétique (KE):~~

~~KE=12 eV−10.2 eV=1.8 eV~~

~~Ainsi, après avoir absorbé le photon, l'électron transite vers le niveau n=2 et acquiert également une énergie cinétique de 1.8 eV en raison de l'énergie excédentaire du photon.~~

b) **Nous avons retiré cet exercice** parce que l'énergie du photon, 12 eV, ne correspond à aucune des transitions possibles partant de $n = 1$ allant jusqu'à $n > 1$, le photon ne peut donc pas être absorbé.
Selon le principe de quantification de l'énergie, seuls les photons/radiations avec une énergie parfaitement égale à la différence d'énergie entre deux niveaux, n_i and n_j (avec $\mathrm{E}(\mathrm{n}_i) < \mathrm{E}(\mathrm{n}_j)$) peut être absorbé par le système pour promouvoir un électron jusqu'au niveau n_j.

c) ~~Lorsque des systèmes atomiques interagissent avec des photons de haute énergie qui fournissent plus d'énergie que nécessaire pour une transition entre des niveaux quantifiés, l'énergie excédentaire n'est pas perdue. Au contraire, elle devient l'énergie cinétique de l'électron. L'électron peut alors se déplacer plus rapidement à l'intérieur de l'atome ou être complètement éjecté de l'atome, un phénomène connu en physique atomique sous le nom d'effet photoélectrique~~.

c) **Nous avons aussi retiré cet exercice** parce que nous n'avons pas aborder les photons/radiations de haute énergie pendant le cours. Si la question vous intéresse, poursuivez la lecture de ce paragraphe. Les interactions entre les systèmes atomiques et les photons peuvent se diviser en trois grandes classes, catégorisées en fonction de la quantité d'énergie du photon incident:

1. **Régime de faible énergie (Visible jusqu'au proche UV)**: Dans cet intervalle, les interactions sont gouvernées pas les principes de mécanique quantique, en particuliers la quantification de l'énergie. Ce qui se traduit par l'apparition de raies spectrales discrètes sur les spectres d'absorption et d'émission de ces systèmes, en fonctions des différentes transition permises ou interdites selon les règles quantiques (tel que vu en classe !).
2. **Régime d'énergie modérée (UV)**: Dans cet intervalle la photo-ionisation domine. Lorsque l'énergie du photon est plus haute que l'énergie de liaison de l'électron mais toujours dans le même ordre de grandeur, le photon libère l'électron de son attraction au noyau, produisant ainsi un électron libre. L'énergie cinétique de l'électron libéré correspond à l'excès d'énergie vis-à-vis du potentiel d'ionisation de l'électron, tel que décrit par l'effet photo-électrique (tel que vu en classe !).
3. **Régime de haute énergie (rayons-X aux rayons Gamma)**: Pour les photons dont l'énergie dépasse celle de l'électron au repos (~511 keV), des processus de diffusion, tel que la diffusion de Thomson et Compton dominent. Pour des énergies encore plus hautes atteignant le MeV (gamma rays), des interactions plus complexes peuvent avoir lieu, en particulier la création de paires, la photodésintégration, et la fission photonique. Ces procédés de très haute énergie peuvent engendrer des interactions à la fois avec le noyau et les électrons de l'atome (pas vu en classe !).