Mécanique quantique I

Séance d'exercices 1 : États liés du puits carré

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.

3. PUITS CARRÉ FINI EN 3 DIMENSIONS
   On considère maintenant un puits carré fini en 3 dimensions de la forme :

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & r < a \\ 0 & r > a \end{cases}$$

   où V_0 est positif.
   (a) Écrire, en coordonnées sphériques, l'équation de Schrödinger stationnaire pour une particule de masse m évoluant dans ce potentiel central.
   (b) Exprimer l'unité d'énergie en fonction des paramètres du problème. Puis, choisir les unités $\hbar = 2m = a = 1$ et récrire l'équation de Schrödinger dans ces unités.

quic.ulb.ac.be, zvherstr@ulb.ac.be

(c) En posant $\psi(\mathbf{r}) = r^{-1}u_l(r)Y_l^m(\Omega)$, établir l'équation vérifiée par $u_l(r)$. Particulariser pour l'onde s. Dans la suite, on considèrera uniquement ce dernier cas.

(d) Résoudre cette équation dans le cas $-V_0 < E < 0$ en introduisant les variables $\alpha = \sqrt{V_0 + E}$ et $\epsilon = \sqrt{-E}$. Déduire une condition de quantification de l'énergie.

(e) Par une méthode graphique utilisant la variable α, discuter le nombre d'états liés du puits carré en fonction du paramètre V_0.

(f) Déterminer et normer les fonctions propres radiales $u_{n_r0}(r)$ associées aux différentes énergies E_{n_r0} possibles, où n_r est le nombre quantique radial. Les représenter schématiquement.

(g) En fonction de son énergie, calculer la probabilité de présence de la particule *hors* du puits ($r > a$).

RAPPEL UTILE

$$\begin{aligned}\Delta &= \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \\ &= \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right)\end{aligned}$$