<u>Mécanique Quantique</u>

<u>TD3:</u> Modèle de la particule libre dans une boite:

Boite de Potentiel 3D

1. Introduction

On sait très bien que les quatre états de la matière dans la nature

- Etat solide qui a une forme bien déterminée et les atomes sont fixes dans l´espace
- Etat liquide où les particules sont en interactions mutuelles et en mouvement permanentant
- Etat de plasma considéré comme un gaz ionisé c á d dissocie
- Etat gazeux (CH_4, O_2, H_2 ….) ou vapeur les molécules constituant le gaz sont d´environ 30 A° de distance entre eux. Donc on dit que les interactions sont faibles.

Dans cette partie on peut prendre les molécules de gaz dans une enceinte c á d boite (3D) fermée est les molécules sont confinées dedans.

2. Molécules de gaz dans une enceinte fermée (3D)

Soit la boite (enceinte) montrée dans la figure 1 où les molécules de l´hydrogène sont confinées

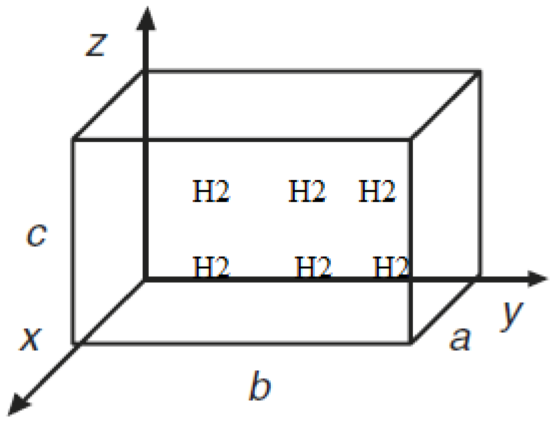

Figure 1. Enceinte 3D contenant le gaz d´hydrogène H_2 : Pris et modifié de [1]

Les molécules de gaz sont en mouvement permanent avec une vitesse d´ordre 500 m/s à température ambiante. Pour un gaz parfait il est considéré que les molécules n´interagissent pas entre eux et on peut déterminer séparément l´énergie cinétique, dépend de la température, de chaque molécule. En utilisant cette analyse, on peut traiter chaque molécule individuellement.

Soit une molécule dans une boite parallélépipédique de côtés *a, b, c* comme montré dans la figure 1. La molécule considérée est libre c á d ne subit aucun effet d´un champ extérieur à l´intérieur de l´enceinte**.** Lorsque la molécule se rapproche des parois de l´enceinte donc elle sera automatiquement repoussée, vers l´intérieur, par les atomes de la surface des parois alors on a un potentiel V(*x, y, z*) qui augmente au voisinage de la paroi.

Ce potentiel est infiniment élevé aux parois :

$x = 0$ et $x = a$, $y = 0$ et $y = b$ *et* $z = 0$ et $z = c$

et nul à l´intérieur c á d :

V(x,y,z) = 0 pour x entre 0 et a, y entre 0 et b et z entre 0 et c (Figure 2)

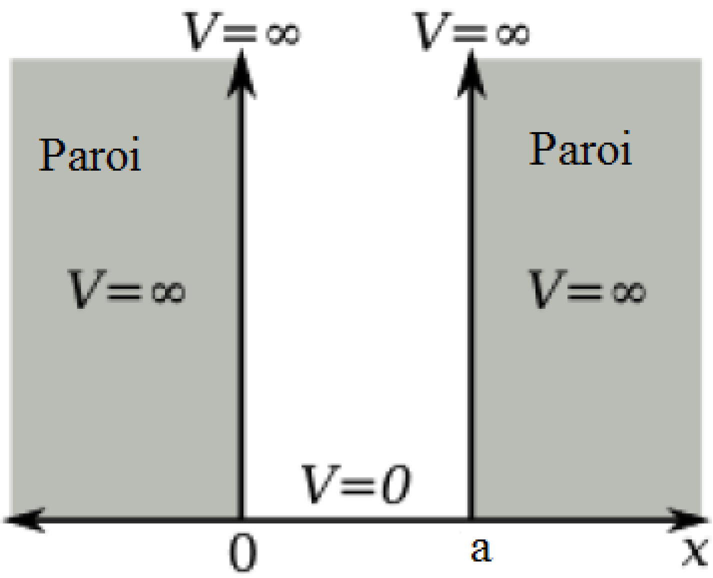

Figure 2. Le potentiel est nul dans la boîte et infini ailleurs et même chose pour y et z : Pris et modifié de [2]

On s´intéresse à trouver les états quantiques stationnaires de la molécule dans la boite. Donc équation de Schrödinger indépendante du temps est :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z) \qquad (1)$$

Avec V (x,y,z) = 0 à l´intérieur de la boite , m est la masse de la molécule et

$$\Delta = \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}.$$

La détermination de $\psi(x, y, z)$ et E se ramène à la résolution de l'équation d'onde (1) dans un domaine intérieur à l'enceinte, avec les conditions aux limites :

$\psi(0, y, z) = \psi(a, y, z) = 0$; $\psi(x, 0, z) = \psi(x, b, z) = 0$

$$\psi(x, y, 0) = \psi(x, y, c) = 0 \tag{2}$$

- **Méthode de séparation des variables :**

D'abord, nous supposons que ψ peut s'exprimer comme un produit de trois fonctions indépendantes, la première dépendant seulement de x et la seconde seulement de y, et la derrière dépendant de z. come indiqué ci-après :

$$\psi(x, y, z) = X(x)\, Y(y)\, Z(z)$$

En remplaçant dans l´équation (1) il vient :

$$\frac{1}{X}\frac{d^2X}{dx^2} + \frac{1}{Y}\frac{d^2Y}{dy^2} + \frac{1}{Z}\frac{d^2Z}{dz^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}E$$

Où chaque partie de la gauche de cette équation dépend qu´une seule variable avec :

$$E = E_x + E_y + E_z.$$

On remplace l´énergie par sa valeur on peut trouver facilement :

$$\frac{1}{X}\frac{d^2X}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}E_x \quad ; \quad \frac{1}{Y}\frac{d^2Y}{dy^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}E_y \quad ; \quad \frac{1}{Z}\frac{d^2Z}{dz^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}E_z \tag{3}$$

Chaque partie de l´équation (3) est une équation différentielle de 2eme ordre à une seule variable dont la solution est connue :

Exemple de la première partie de variable x :

$$\frac{1}{X}\frac{d^2X}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}E_x \qquad (4)$$

La solution est :

$X(x)= A.\sin(k.x+c)$ avec A, k et C : constantes

En utilisant les conditions aux limite : X(0) = X(a) = 0

On trouve :

$$X_n(x) = N \sin \frac{n\pi x}{a} \qquad (5)$$

où n est la suite des nombres entiers relatifs et N un coefficient de normalisation qu'on détermine en écrivant :

$$\int_0^a |X_n(x)|^2\, dx = |N|^2 \frac{a}{2} = 1$$

On remplace N par sa valeur à (5) on obtient la solution finale suivante :

$$X_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a} \qquad (6)$$

Reportant $X_n(x)$ dans l'équation différentielle (4), on obtient les valeurs de l'énergie :

$$E_{x,n} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n^2$$

On obtient une suite discrète de valeurs de l'énergie, caractérisées chacune par un *nombre quantique n*, avec $n = 1, 2, 3, \ldots$ À chaque valeur de $E_{x,n}$ correspond une seule fonction propre.

On fait la même chose pour les deux autres variables : *y et z* et puis on remplace dans l´équation suivante :

$$\psi(x, y, z) = X(x)\, Y(y)\, Z(z) \qquad (7)$$

On obtient :

Les fonctions d'onde sont obtenues en multipliant (équation 7) entre elles les solutions obtenues de x avec celles analogues en y et z, soient:

$$\psi_{n_1\,n_2\,n_3}(x,\,y,\,z) = \left(\frac{8}{abc}\right)^{1/2} \sin\frac{n_1\pi x}{a}\,\sin\frac{n_2\pi y}{b}\,\sin\frac{n_3\pi z}{c}$$

avec n_1, n_2, n_3 = 1, 2, 3, . . . Ces trois ***nombres quantiques*** caractérisent un état d'énergie cinétique de la molécule. Les niveaux d'énergie sont donnés par :

$$E_{n_1\,n_2\,n_3} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left(\frac{n_1^2}{a^2}+\frac{n_2^2}{b^2}+\frac{n_3^2}{c^2}\right)$$

Discussion

L´énergie $E_{n1\,n2\,n3}$ est quantifiée c à d elle ne prend que des valeurs discrètes selon n_1, n_2 *et* n_3

Car particulier si: $a = b = c$ donc la boite devient un cube et dans ce cas là à certains niveaux correspondent alors plusieurs fonctions d'onde. Ainsi, les trois fonctions d'onde ψ_{112}, ψ_{121}, ψ_{211} ont le même niveau d'énergie. On dit que le niveau d'énergie est ***dégénéré***.

Références

[1] J. Hladik et all, Mécanique quantique : Atomes et noyaux Applications technologiques, 3eme édition, Dunod, Paris, 1997, 2002, 2009

[2] *https://fr.wikipedia.org/wiki/Particule_dans_une_bo%C3%AEte*