**6.8.2 Puits-Exercice 12**

---

Un électron est confiné dans un cube de coté a.
Le potentiel $V(x,y,z)$ vaut : $V(x,y,z) = 0$ si $0 \leq x \leq a$ et $0 \leq y \leq a$ et $0 \leq z \leq a$
$V(x,y,z) = \infty$ sinon
La fonction d'onde est : $\psi(M,t) = \phi_x(x)\phi_y(y)\phi_z(z)\,exp(-i\frac{E}{\hbar}t)$

a-Pourquoi l'énergie de l'électron n'est-elle pas nulle dans son état fondamental ?
Montrer que $E_1 = A\frac{\hbar^2}{ma^2}$

b-Expliciter $\psi(M,t)$ en dehors du cube. Etablir les équations différentielles pour $\phi_x(x)$,$\phi_y(y)$ et $\phi_z(z)$.

c-Déterminer $\phi_x(x)$,$\phi_y(y)$ et $\phi_z(z)$ puis l'expression finale de la fonction d'onde $\psi(M,t)$

d-Déterminer l'énergie de l'électron et commenter.

---

a-<u>L'inégalité spatiale de Heisenberg</u> impose une énergie minimale de confinement non nulle
Inégalité spatiale de Heisenberg : $\Delta x.\Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$
On a : $\Delta x \approx a$ et $\Delta p \approx \sqrt{2mE}$
Donc : $a.\sqrt{2mE} \geq \frac{\hbar}{2}$ => $a^2.2mE \geq \frac{\hbar^2}{4}$ => $E \geq \frac{\hbar^2}{8ma^2}$ Donc : $\boxed{E_1 = \frac{\hbar^2}{8ma^2}}$

b-En dehors du cube le potentiel est infini donc la probabilité de présence de la particule est nulle : $\psi(M,t) = 0$
<u>Equation de Schrödinger indépendante du temps</u> dans le cube : $-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\phi = E\phi$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{d^2\phi_x}{dx^2}(x)\phi_y(y)\phi_z(z) + \frac{d^2\phi_y}{dy^2}(y)\phi_x(x)\phi_z(z) + \frac{d^2\phi_z}{dz^2}(z)\phi_y(y)\phi_x(x)\right] = E\phi_x(x)\phi_y(y)\phi_z(z)$$

En divisant par $\phi_x(x)\phi_y(y)\phi_z(z)$ : $\frac{\frac{d^2\phi_x}{dx^2}}{\phi_x(x)} + \frac{\frac{d^2\phi_y}{dy^2}}{\phi_y(y)} + \frac{\frac{d^2\phi_z}{dz^2}}{\phi_z(z)} = -\frac{2m}{\hbar^2}E$

On en déduit : $\frac{\frac{d^2\phi_x}{dx^2}}{\phi_x(x)} = constante = -k_1^2$ $\frac{\frac{d^2\phi_y}{dy^2}}{\phi_y(y)} = constante = -k_2^2$ $\frac{\frac{d^2\phi_z}{dz^2}}{\phi_z(z)} = constante = -k_3^2$

Avec : $k_1^2 + k_2^2 + k_3^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E$

Donc : $\boxed{\frac{d^2\phi_x}{dx^2} + k_1^2\phi_x(x) = 0}$ $\boxed{\frac{d^2\phi_y}{dy^2} + k_2^2\phi_y(y) = 0}$ $\boxed{\frac{d^2\phi_z}{dz^2} + k_3^2\phi_z(z) = 0}$

c-Solution : $\phi_x(x) = A_1\sin(k_1x) + B_1\cos(k_1x)$
Conditions de continuité de la fonction d'onde : $\phi_x(0) = 0 = B_1$
$\phi_x(a) = 0 = A_1\sin(k_1a)$
Donc : $k_1a = n\pi$ avec n entier positif

Finalement : $\boxed{\phi_x(x) = A_1\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)}$

De même : $\boxed{\phi_y(y) = A_2\sin\left(\frac{p\pi}{a}y\right)}$ $\boxed{\phi_z(z) = A_3\sin\left(\frac{q\pi}{a}z\right)}$ avec p et q entiers positifs

La fonction d'onde est : $\boxed{\psi(M,t) = A_1A_2A_3\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\sin\left(\frac{p\pi}{a}y\right)\sin\left(\frac{q\pi}{a}z\right)exp(-i\frac{E}{\hbar}t)}$

d-$k_1^2 + k_2^2 + k_3^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E$ => $\frac{\pi^2}{a^2}(n^2 + p^2 + q^2) = \frac{2m}{\hbar^2}E$ => $\boxed{E = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}(n^2 + p^2 + q^2)}$
L'énergie est quantifiée par trois entiers

---