Équation de Schrödinger et la particule dans une boîte.

Fonction d'onde pour une particule dans une boîte : $\psi_n^{P.boîte} = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right)$

$A = \frac{-h^2}{8\pi^2 m_e}$

Équation de Schrödinger (générale) $A \frac{d^2}{dx^2} \psi_n(x) + U\psi_n(x) = E\psi_n(x)$

Équation de Schrödinger (p. boîte où U=0) $A \frac{d^2}{dx^2} \psi_n(x) = E\psi_n(x)$

Prouvez que :

1) La fonction d'onde $\psi_n^{P.boîte}(x)$ est une fonction propre pour l'équation de Schrödinger
2) $\psi_n^{P.boîte}(x)$ respecte les conditions aux limites : $\psi_n^{P.boîte}(0) = \psi_n^{P.boîte}(L) = 0$
3) La fonction d'onde est normalisée : $\int_0^L \left(\psi_n^{P.boîte}(x)\right)^2 dx = 1$
4) On peut trouver l'énergie : $E_n^{P.boîte} = \frac{h^2 n^2}{8 L^2 m_e}$

---

1)

$$A \frac{d^2}{dx^2} \psi_n(x) = E\psi_n(x)$$

Fonction propre?

$$A \frac{d^2}{dx^2}\left(\sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right)\right) = E\left(\sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right)\right)$$

$$A\left(\underbrace{\sqrt{\frac{2}{L}} (-1) \frac{n^2\pi^2}{L^2} \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right)}_{\psi_n^{P.boîte}(x)}\right) = E \underbrace{\sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right)}_{\psi_n^{P.boîte}(x)}$$

$$A\left(-\frac{n^2\pi^2}{L^2}\right) \psi_n^{P.boîte}(x) = E\psi_n^{P.boîte}(x)$$

$$\therefore \psi_n^{P.boîte}(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right)$$

2) $\psi_n^{P.boite}(0) = \psi_n^{P.boite}(L) = 0$ **?**

$$\psi_n^{P.boite}(0) = \sqrt{\frac{2}{L}}\,\underbrace{\sin\left(\frac{n\pi}{L}0\right)}_{=0} = 0 \quad \checkmark$$

$$\psi_n^{P.boite}(L) = \sqrt{\frac{2}{L}}\,\underbrace{\sin\left(\frac{n\pi}{\cancel{L}}\cancel{L}\right)}_{\sin(n\pi)=0} = 0 \quad \checkmark$$

3) $\int_0^L \left(\psi_n^{P.boite}(x)\right)^2 dx = 1$ **?**

> Remarque :
>
> $$\int \sin^2(ax)\,dx = \frac{x}{2} - \frac{\sin(2ax)}{4a}$$
>
> (Clic pour ressource en ligne pour les intégrales)

$$\int_0^L \left(\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)\right)^2 dx = \frac{2}{L}\int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right)dx$$

$$= \frac{2}{L}\left[\left(\frac{L}{2} - \frac{\sin\left(\frac{2n\pi}{\cancel{L}}\cancel{L}\right)}{\frac{4n\pi}{L}}\right) - \left(\frac{0}{2} - \frac{\sin\left(\frac{2n\pi}{L}0\right)}{\frac{4n\pi}{L}}\right)\right]$$

$$= \frac{2}{L}\left[\left(\frac{L}{2} - 0\right) - (0 - 0)\right]$$

$$= 1 \quad \checkmark$$

4) $E_n^{p.boîte} = ?$

$$-\frac{h^2}{8\pi^2 m_e}\underbrace{\frac{d^2}{dx^2}\psi_n^{p.boite}}_{\text{déjà trouvé}} = E_n^{p.boite}\,\psi_n^{p.boite}$$

$$\cancel{-}\frac{h^2}{8\cancel{\pi^2} m_e}\left(\cancel{-}\frac{n^2\cancel{\pi^2}}{L^2}\right)\cancel{\psi_n^{p.boite}(x)} = E_n^{p.boite}\,\cancel{\psi_n^{p.boite}}$$

$$E_n^{p.boîte} = \frac{h^2 n^2}{8L^2 m_e}$$