MECANIQUE QUANTIQUE
Chapitre 3:
Solutions stationnaires de l'équation de Schrödinger

Pr. M. ABD-LEFDIL
Université Mohammed V- Agdal
Faculté des Sciences
Département de Physique
Année universitaire 06-07
Filières SM-SMI

On a vu que l'équation de Schrödinger dépendante du temps était donnée par:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r},t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r},t) \right)(\psi(\vec{r},t)$$

Lorsque le potentiel V est indépendant du temps V(r,t)=V(r), l'équation de Schrödinger devient:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r},t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r}) \right)\psi(\vec{r},t) = H\psi(\vec{r},t)$$

H est appelé Hamiltonien du système.
les solutions de l'équation de Schrödinger seront dites solutions stationnaires.
Le système est dit conservatif et son énergie est constante.

La fonction d'onde peut être écrite sous forme d'un produit de fonction spatiale ϕ et de fonction temporelle u: $\psi(x,t)= \phi(x)\ u(t)$

Substituons cette expression de ψ dans l'équation de Schrödinger, on obtient:

$$i\hbar\frac{\partial u}{\partial t}\phi(x)=\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right)\phi(x)\,u(t)$$

$$i\hbar\frac{\partial u}{\partial t}\frac{1}{u(t)}=\frac{1}{\phi(x)}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right)\phi(x)$$

On voit qu'un terme temporel (en t) est égal à un terme spatial: ceci n'est vrai que s'ils sont tous les deux égaux à une constante. On note que cette constante a la dimension d'une énergie (h divisée par le temps, soit en joule),

On prendra cette constante égale à E.

$$i\hbar\frac{\partial u}{\partial t}\frac{1}{u(t)}=E \Leftrightarrow \frac{\partial u}{u}=\frac{1}{i\hbar}Edt \Leftrightarrow u(t)=A\,e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

A est une constante donnée par les conditions initiales.

La résolution de l'équation de Schrödinger se ramène à celle en $\phi(x)$.

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right)\phi(x)=E\phi(x)$$

On obtient alors:

$$\psi(x,t)=A\,e^{-i\frac{E}{\hbar}t}\,\phi(x)$$

A 3 dimensions, on obtient:

$$\psi(\vec{r},t)=A\,e^{-i\frac{E}{\hbar}t}\,\phi(\vec{r})$$

Etude de quelques systèmes unidimensionnels

On se limitera à des formes de potentiel très simplifiées afin de pouvoir résoudre sans difficulté majeur l'équation de Schrödinger. Bien que les formes du potentiel que nous allons étudier soient simples, ils correspondent à des applications très importantes.

1- Saut de potentiel
2- Barrière de potentiel
3- Puits de potentiel fini en TD
4- Puits de potentiel infini
5- Particule dans une boite (3D) en TD

1- Saut de potentiel

Il est défini par:

$$V(x)=\begin{cases}0 & \text{si } x<0 \quad \text{région I}\\ V_0 & \text{si } x>0 \quad \text{région II}\end{cases}$$

L'énergie E de la particule doit être positive afin que l'onde incidente soit une onde de propagation. On supposera que La particule vient du coté négatif de l'axe des abscisses x. Nous allons distinguer deux cas: x< 0 et x> 0.

A- $E > V_0$

1- x< 0: l'équation de Schrodinguer s'écrit:

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2\phi(x)}{dx^2}=E\phi(x)\Leftrightarrow\frac{d^2\phi(x)}{dx^2}+k_1^2\phi(x)=0 \quad \text{où } k_1^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$$

La solution générale est alors donnée par:

$$\phi_1(x)=Ae^{ik_1x}+Be^{-ik_1x}$$

L'onde incidente est représentée par le terme $\exp(ik_1x)$ et qui correspond à une onde plane allant de gauche vers la droite. Lorsque la particule arrive en x=0, elle peut soit être réfléchie, soit être transmise.
L'onde réfléchie est représentée par le terme $\exp(-ik_1x)$.

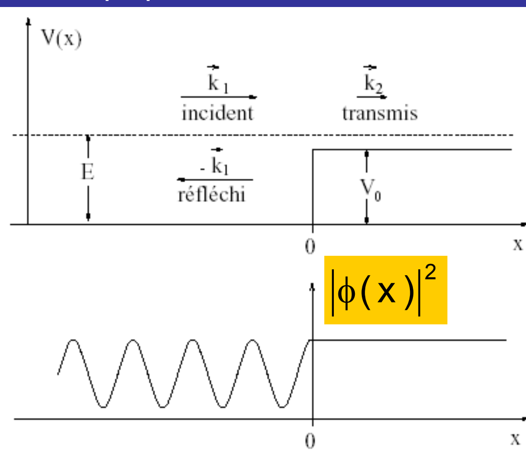
2- x> 0: l'équation de Schrodinger s'écrit:

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + V_0\phi(x) = E\phi(x) \Leftrightarrow \frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + k_2^2\phi(x) = 0$$

Avec: $$k_2^2 = \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}$$

La solution générale est alors donnée par: $$\phi_2(x) = Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x}$$

Le premier terme en $\exp(ik_2x)$ correspond à une onde plane allant de gauche vers la droite: il représente donc l'onde transmise.
Par contre le second terme représente une onde venant de + l'infini allant vers la gauche. Comme nous n'avons pas de particule qui provient dans ce sens, nous poserons D= 0



Remarque: L'onde incidente et l'onde réfléchie interférent comme le montre la figure précédente.

Conditions aux limites:
La fonction $\phi(x)$ et sa première dérivée $\phi'(x)$ doivent être continues en x= 0.

$$\phi(0^-) = \phi(0^+) \Leftrightarrow A + B = C$$

$$\phi'(0^-) = \phi'(0^+) \Leftrightarrow (A - B) = \frac{k_2}{k_1} C$$

On trouve:

$$B = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} A \quad \text{et} \quad C = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} A$$

Pour x< 0, La densité de probabilité $\rho=\phi^*(x)\,\phi(x)$ est donnée par:

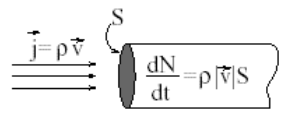
$$|\phi(x)|^2 = AA^* \left[1 + \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2 + 2\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \text{Cos}(2k_1 x) \right]$$

Pour x> 0, La densité de probabilité $\rho=\phi^*(x)\,\phi(x)$ est donnée par:

$$|\phi(x)|^2 = AA^* \frac{4k_1^2}{[k_1 + k_2]^2}$$

Détermination de la densité de courant de probabilité J:

$$\vec{J} = \rho \vec{v} = \psi^* \psi \frac{\vec{p}}{m}$$



Le taux de comptage dN/dt dans un détecteur de surface S exposé à un flux de particules dont la densité est j=ρ v.
ρ étant la densité des particules, v leur vitesse

$$\text{Onde incidente} : J_i = \frac{\hbar k_1}{m} AA^*$$

$$\text{Onde réfléchie} : J_r = -\frac{\hbar k_1}{m} AA^* \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2$$

$$\text{Onde transmise} : J_t = \frac{\hbar k_2}{m} AA^* \frac{4k_1^2}{[k_1 + k_2]^2}$$

La probabilité de réflexion s’exprime par:

$$R = \left|\frac{J_r}{J_i}\right| = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2$$

La probabilité de transmission s’exprime par:

$$T = \left|\frac{J_t}{J_i}\right| = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}$$

On remarque que: $R + T = 1$

Remarque: Dans une situation analogue en mécanique classique, la particule serait toujours transmise, alors qu’en mécanique quantique elle a une probabilité non nulle d’être réfléchie

B- E < V_0

1- x< 0: l'équation de Schrodinguer ne change pas:

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} = E\phi(x) \Leftrightarrow \frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + k_1^2\phi(x) = 0 \quad \text{où} \, k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

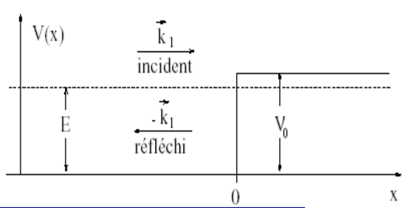
$$\phi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$$

2- x> 0: l'équation de Schrodinguer s'écrit:

$$\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + k_2^2\phi(x) = 0$$

avec

$$k_2^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}$$



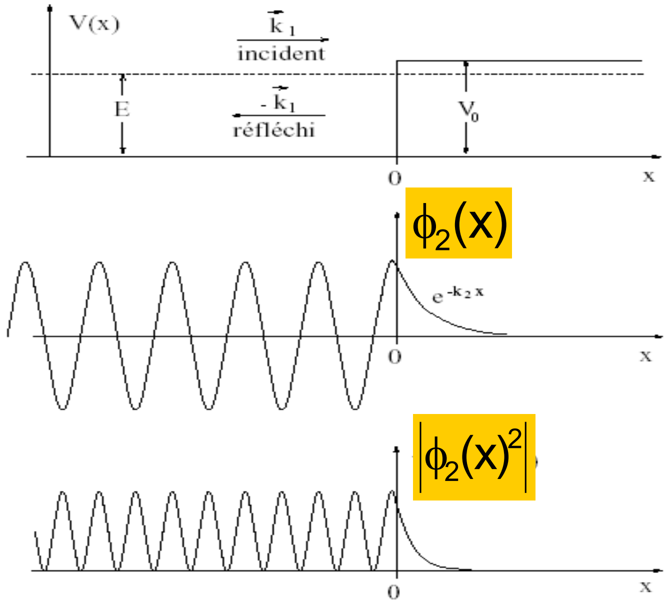
La solution générale est donnée par:

$$\phi_2(x) = Ce^{k_2x} + De^{-k_2x}$$

L'exponentielle positive diverge et ne représente donc pas une solution physique: C= 0.Il reste:

$$\phi_2(x) = De^{-k_2x}$$

ϕ_2 tend vers 0 à l'infini: C'est une onde évanescente. Il n'y a pas d'onde transmise.



Conditions aux limites:
La fonction $\phi(x)$ et sa première dérivée $\phi'(x)$ doivent être continues en x= 0.

$$\phi(0^-) = \phi(0^+) \Leftrightarrow A + B = D$$

$$\phi'(0^-) = \phi'(0^+) \Leftrightarrow (A - B) = i\frac{k_2}{k_1}D$$

On trouve:

$$A = \frac{D}{2}\frac{k_1 + ik_2}{k_1} \quad \text{et} \quad B = \frac{D}{2}\frac{k_1 - ik_2}{k_1}$$

Détermination de la densité de courant de probabilité J comme dans la première partie:

$$\vec{J} = \rho \vec{v} = \psi^* \frac{\vec{p}}{m} \psi$$

$$J_i = \frac{\hbar k_1}{m} \frac{1}{4} DD^* \frac{k_1 + ik_2}{k_1} \frac{k_1 - ik_2}{k_1} \Leftrightarrow$$

$$J_i = +\frac{1}{4} DD^* \frac{k_1^2 + k_2^2}{k_1^2} \frac{\hbar k_1}{m}$$

$$J_r = -\frac{1}{4} DD^* \frac{k_1^2 + k_2^2}{k_1^2} \frac{\hbar k_1}{m}$$

On a le coefficient de réflexion R: $R = \left|\frac{J_r}{J_i}\right| = 1$

Remarques

1- R dépend de la valeur de E par rapport à V_0

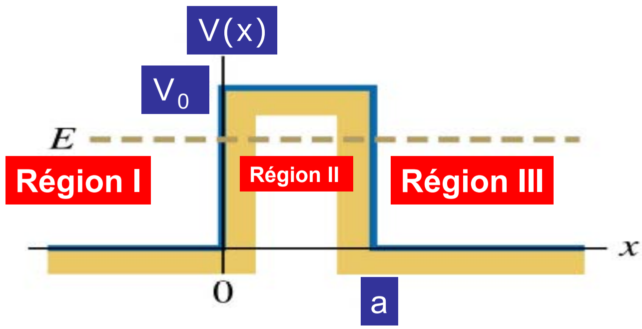
$$R = \begin{cases} 1 & \text{si } E < V_0 \\ \left(\dfrac{1 - \sqrt{1 - \dfrac{V_0}{E}}}{1 + \sqrt{1 - \dfrac{V_0}{E}}} \right)^2 & \text{Si } E > V_0 \end{cases}$$

2- Comme l'équation de Schrödinger est linéaire, la superposition de solutions du type présenté est aussi une solution. On peut alors construire une solution type paquet d'ondes, qui seront en partie réfléchies et en partie transmis.

2- Barrière de Potentiel

Elle est définie par:

$$V(x)=\begin{cases}0 & \text{si } x<0 \quad \text{région I}\\ V_0 & \text{si } 0<x<a \quad \text{région II}\\ 0 & \text{si } x>a \quad \text{région III}\end{cases}$$



1- x< 0 (région I): l'équation de Schrodinguer s'écrit:

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2\phi(x)}{dx^2}=E\phi(x)\Leftrightarrow\frac{d^2\phi(x)}{dx^2}+k_1^2\phi(x)=0 \quad \text{où } k_1^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$$

La solution générale est alors donnée par:

$$\phi_1(x)=Ae^{ik_1x}+Be^{-ik_1x}$$

2- x> a (région III): l'équation de Schrodinguer s'écrit:

La solution générale est alors donnée par:

$$\phi_3(x)=C\,e^{ik_1x}$$

3- 0<x< a (région II): l'équation de Schrodinguer s'écrit:

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2\phi(x)}{dx^2}+V_0\phi(x)=E\phi(x)$$

Dans cette zone 0<x< a, on distingue deux cas:

a- $E<V_0$:

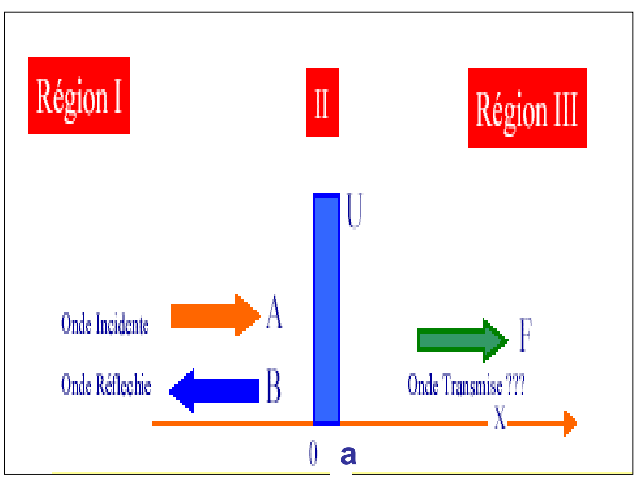
$$\phi_2(x) = Fe^{k_2 x} + Ge^{-k_2 x} \quad \text{avec } k_2 = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 - E)}$$

b- $E>V_0$:

$$\phi_2(x) = Fe^{ik_3 x} + Ge^{-ik_3 x} \quad \text{avec } k_3 = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E - V_0)}$$

Classiquement: si $E>U_0$, la traversée de la barrière est possible. Par contre pour $E<U_0$, il est impossible.

Qu'en est il en mécanique quantique?



Conditions aux limites:
La fonction $\phi(x)$ et sa première dérivée $\phi'(x)$ doivent être continues en x= 0 et en x=a.

$$\phi(0^-) = \phi(0^+) \quad \text{et} \quad \phi(a^-) = \phi(a^+)$$

$$\phi'(0^-) = \phi'(0^+) \quad \text{et} \quad \phi'(a^-) = \phi'(a^+)$$

On pourra ainsi déterminer les constantes B, C, F et G en fonction de A (A étant l'amplitude de l'onde incidente)

Pour déterminer cette probabilité, on calculera les densités de courant de probabilité: $\rightarrow$

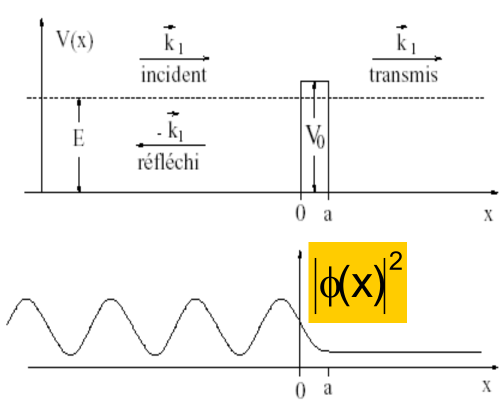
$$J_i = \frac{\hbar k_1}{m} AA^*$$

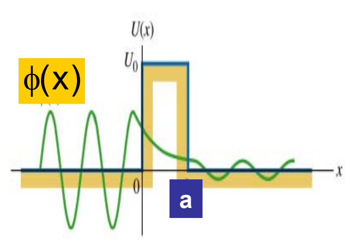
$$J_r = -\frac{\hbar k_1}{m} BB^*$$

$$J_t = \frac{\hbar k_1}{m} CC^*$$

Le coefficient de transmission T est alors donné par:

$$T = \frac{J_t}{J_i} = \frac{CC^*}{AA^*}$$





E<V_0:

$$T = \left[1 + \frac{\sinh^2(k_2 a)}{4\frac{E}{V_0^2}(V_0 - E)}\right]^{-1}$$

$$\text{Où } k_2 a = \sqrt{\frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2}\left(1 - \frac{E}{V_0}\right)}$$

T représente la probabilité de transmission par effet tunnel. C'est un phénomène très important en physique.(Microscope à effet tunnel, Électronique, …)

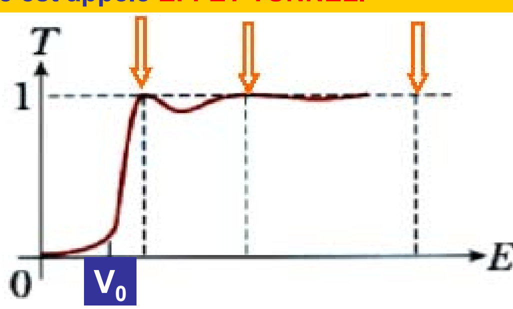
E>V_0:

$$T = \left[1 + \frac{\sin^2(k_3 a)}{4\frac{E}{V_0^2}(E - V_0)}\right]^{-1}$$

$$\text{Où } k_3 a = \sqrt{\frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2}\left(\frac{E}{V_0} - 1\right)}$$

T oscille en fonction de E et devient totale seulement pour certaines valeurs de celle-ci.

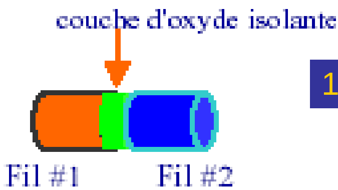
Le fait le plus remarquable est que même pour E<V0, la particule à une certaine probabilité d'être transmise. Ce qui est contraire à la physique classique.
Ce phénomène est appelé EFFET TUNNEL.



T dépend de la hauteur de barrière V_0, de sa largeur a ainsi que de l'énergie E de la particule incidente.
Pour E>V_0, sinh devient oscillant. Ce qui conduit à T oscillatoire aussi.
La résonance T=1 se produit seulement pour quelques valeurs d'énergie spécifiques.
Pour d'autres valeurs de E, certaines particules sont réfléchies même pour E>V_0: c'est là la nature ondulatoire d'une particule quantique.

Exercice: Deux fils de cuivre sont séparés par une couche d'oxyde isolante. On modélise cette couche par une hauteur de barrière égale à V_0=10 eV.

1- Estimer le coefficient de transmission dans le<cas où L'énergie incidente de l'électron est de 7 eV.
On distinguera
Les deux cas: a= 5 nm et a=1nm



Solution:

1- On utilisera la formule ci-dessous:

$$T = \left[1 + \frac{\sinh^2(k_2 a)}{4\frac{E}{V_0^2}(V_0 - E)}\right]^{-1}$$

Pour a= 5 nm: T=0,963 10^{-38}

Pour a= 1 nm: T=0,657 10^{-7}

Baisser la largeur de 5 fois, conduit à une augmentation de T de 33 ordres de grandeurs

2- Si un courant électrique de 1 mA arrive sur le fil 1, quel sera le courant à l'autre extrémité du fil 2 après avoir traversé la couche isolante d'épaisseur a= 1nm

Solution:

$$1mA = \frac{q}{t} = \frac{Ne}{t} \Leftrightarrow N = 6{,}25\,10^{13}\,\text{électrons}$$

N est le nombre d'électrons dans la zone du fil 1.
1 mA correspond au courant dû aux électrons incidents et réfléchis.

Soit Transmis le nombre d'électrons transmis.

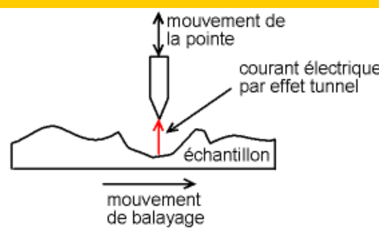
$$N_{transmis} = NT = 4{,}11\;\;10$$

$$I_{transmis} = 65{,}7\ \text{pA}$$

Microscope à effet Tunnel

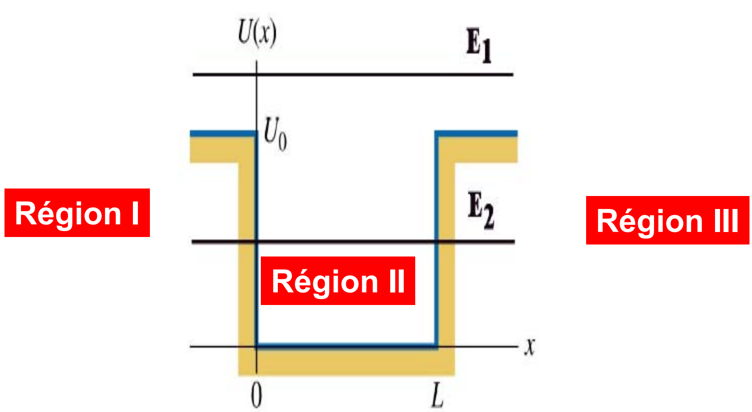
Il s'agit, pour simplifier, d'un palpeur, d'une pointe qui suit la surface de l'objet. La pointe balaie (*scanne*) la surface à représenter, un ordinateur enregistre la hauteur de la pointe, on peut ainsi reconstituer la surface.
Pour cela, avec un système de positionnement de grande précision (réalisé à l'aide de piézoélectriques),
on place **une pointe conductrice** en face de la surface à étudier et l'on mesure le courant résultant du passage d'électrons entre la pointe et la surface par effet tunnel (les électrons libres du métal sortent un peu de la surface, si l'on se met très près sans pour autant la toucher, on peut enregistrer un courant électrique). Dans la plupart des cas, ce courant dépend très rapidement (exponentiellement) de la distance séparant la pointe de la surface, avec une distance caractéristique de quelques dixièmes de nanomètres. Ainsi, on fait bouger la pointe au dessus de l'échantillon avec un mouvement de balayage et on ajuste la hauteur de celle-ci de manière à conserver une intensité du courant tunnel constante. On peut alors déterminer le profil de la surface avec une précision inférieure aux distances inter atomiques. **Mais souvenons-nous que l'on a une image de synthèse, pas une « photographie » des atomes.**

(Première réalisation en 1982 par les chercheurs d'IBM- Zurich. Ces auteurs ont reçu le prix Nobel en 1986.
« STM Scanning Tunneling Microscopy »)
AFM (Atomic Force Microscopy) pour les échantillons non conducteurs.



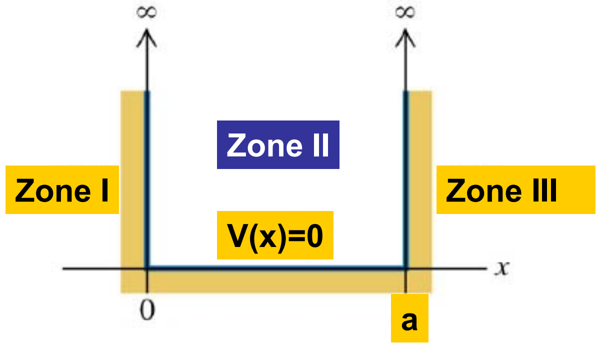
3- Puits de potentiel

Il est défini par:



Ce cas sera traité en TD

4- Puits de potentiel infini



La résolution de l'équation de schrodinger nous donne en tenant compte du fait que: $\phi(0)=\phi(a)=0$

Pour x>a et x<0, il est impossible de trouver la particule (les parois du puits sont rigides):

$$\phi_I(x)=\phi_{III}(x)=0$$

Pour 0< x <a (zone II)

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2\phi(x)}{dx^2}=E\phi(x) \quad \Leftrightarrow \frac{d^2\phi(x)}{dx^2}+k_1^2\phi(x)=0 \quad \text{où } k_1^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$$

La solution est:

$$\phi_{II}(x) \Leftrightarrow Ae^{ikx}+Be^{-ikx}$$

Conditions de raccordements (de continuité):

$$\phi_{II}(0)=\phi_I(0) \Leftrightarrow A+B=0$$

$$\phi_{II}(a)=\phi_{III}(a) \Leftrightarrow Ae^{ika}+Be^{-ika}=0$$

D'où

$A=-B$ et $A(e^{ika}-e^{-ika})=0 \Leftrightarrow k=\frac{n\pi}{a}$ $\quad n\in Z$

Pour 0< x <a

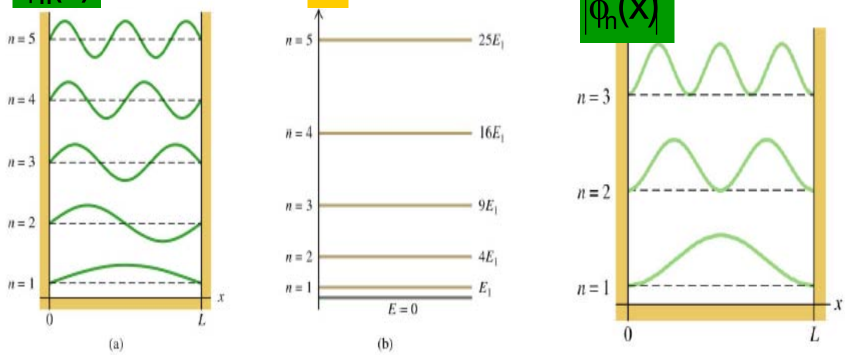
$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$$

Énergie du n^{ième} niveau:
E est quantifiée

Fonction d'onde du nième niveau (où C=Cte de normalisation):

$$\phi_n(x) = C \sin\frac{n\pi}{L}x$$ avec $$C = \sqrt{\frac{2}{L}}$$ et $$\int_0^a \phi_n(x)\phi_m(x)dx = \delta_{nm}$$

$\phi_n(x)$ | E | $|\phi_n(x)|^2$

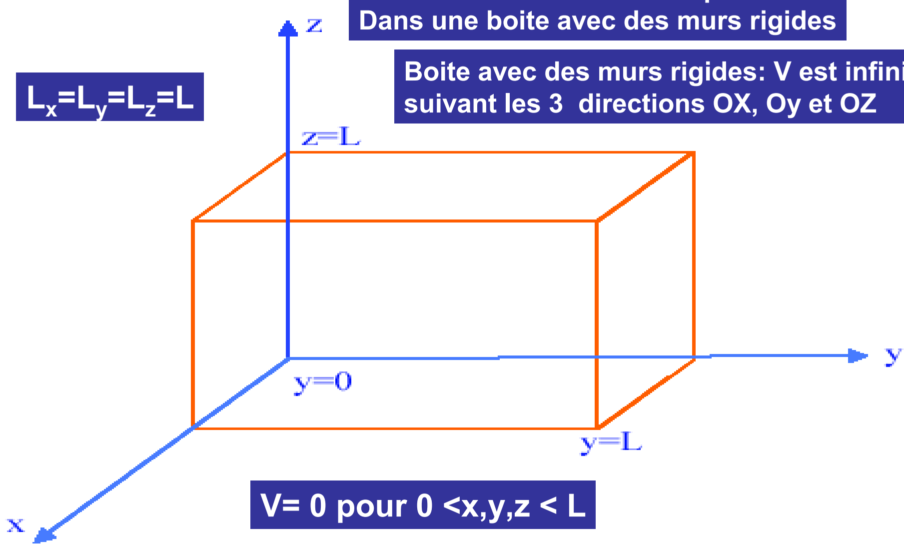


5- Particule dans une boite (3D)

Extension de l'étude d'une particule
Dans une boite avec des murs rigides

Boite avec des murs rigides: V est infini suivant les 3 directions OX, Oy et OZ

$L_x=L_y=L_z=L$



V= 0 pour 0 <x,y,z < L

L'équation de Schrödinger (3D) pour un potentiel indépendant du temps.

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r})\right)\phi(\vec{r}) = H\phi(\vec{r}) = E\phi(\vec{r})$$

On a:

$$\vec{r} = x\,\vec{i} + y\,\vec{j} + z\,\vec{k} \quad \text{et} \quad \phi(\vec{r}) = \phi(x,y,z)$$

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

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) + \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) + \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)$$
$$= E_{Cx} + E_{Cy} + E_{Cz}$$

Or V= 0 pour 0 <x,y,z < L,

L'équation de Schrödinger devient

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\phi(\vec{r}) = H\phi(\vec{r}) = E\phi(\vec{r})$$

Comme x,y et z sont indépendantes, on peut écrire:

$$\phi(\vec{r}) = \phi(x,y,z) = \phi_1(x)\ \phi_2(x)\ \phi_3(x)$$

En substituant dans l'équation de Schrödinger ci-dessous et en divisant par $\phi(x,y,z)$, on obtient:

$$\frac{1}{\phi_1(x)}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\phi_1(x)}{\partial x^2}\right) + \frac{1}{\phi_2(y)}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\phi_2(y)}{\partial y^2}\right) + \frac{1}{\phi_3(z)}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\phi_3(z)}{\partial z^2}\right) = E$$

Comme E=Constante, l'expression n'est vraie que si:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\phi_1(x)}{\partial x^2}=E_1\phi_1(x) \qquad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\phi_2(x)}{\partial x^2}=E_2\phi_2(x)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\phi_3(x)}{\partial x^2}=E_3\phi_3(x)$$

Avec:

$$E_1+E_2+E_3=E$$

E étant l'énergie totale du système 3D.
Chaque terme ressemble à ce qu'on a vu dans le cas d'un puits de potentiel infini. Par conséquent:

$$\phi_1(x)\propto \sin k_1x \qquad \phi_2(x)\propto \sin k_2x \qquad \phi_3(x)\propto \sin k_3x$$

Conditions de raccordement:

$$\phi_i(L)=0 \Leftrightarrow \sin k_iL=0 \Leftrightarrow k_iL=n\pi$$

avec $i=1,2$ et 3

$n\in N^*$

La quantité de mouvement 3D a pour composantes:

$$P_1=\hbar k_1=\hbar k_x=\hbar\frac{\pi}{L_x}n_1 \qquad P_2=\hbar k_2=\hbar k_y=\hbar\frac{\pi}{L_y}n_2$$

$$P_3=\hbar k_3=\hbar k_z=\hbar\frac{\pi}{L_z}n_2$$

$$n_1, n_2 \text{ et } n_3=1,2,\ldots..+\infty$$

L'énergie E est donnée par:

$$E=E_{n_1,n_2,n_3}$$

$$E=\frac{P^2}{2m}=\frac{1}{2m}(P_1^2+P_2^2+P_3^2)=\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}(n_1^2+n_2^2+n_3^2)$$

La fonction d'onde $\phi(x,y,z)$ est donnée par:

$$\phi(x,y,z) = A \sin k_1 x \ \sin k_2 y \ \sin k_3 z$$

Où A est la constante de normalisation.

La fonction d'onde $\psi(x,y,z)$ est donnée par:

$$\psi(x,y,z) = A \sin k_1 x \ \sin k_2 y \ \sin k_3 z \ \ e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

Détermination de A:

$$\iiint_{\text{Boite}} \psi^*(x,y,z)\psi(x,y,z) \ \ dxdydz = 1$$

$$|A|^2 \int_0^L \sin^2 k_1 x \ dx \ \int_0^L \sin^2 k_2 y \, dyx \ \int_0^L \sin^2 k_3 z \ dx = 1$$

On trouve:

$$A = \left(\frac{2}{L}\right)^{\frac{3}{2}}$$

$$\psi(x,y,z) = \left(\frac{2}{L}\right)^{\frac{3}{2}} \sin k_1 x \ \sin k_2 y \ \sin k_3 z \ \ e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

1er état (fondamental): $n_1=n_2=n_3=1$

$$E_{111} = 3\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2} = E_0$$

2 ème état (1er état excité):

$$E_{\text{1er état excité}} = 6\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2} = 2E_0$$

C'est un état dégénéré: même énergie pour 3 états différents.

$$E_{112} = E_{121} = E_{211}$$

	n^2	Dégénérescence
$4\ E_0$	12	Pas de dégénérescence
$11/3\ E_0$	11	3
$3\ E_0$	9	3
$2\ E_0$	6	3
E_0	3	Pas de dégénérescence