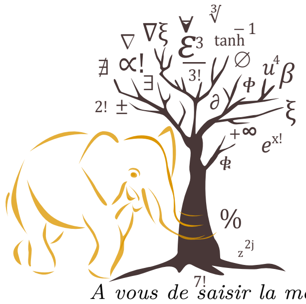
Département des sciences de la matière

Examen de rattrapage - Chimie Quantique

Niveau Master 1

Il est demandé aux étudiants (es) de soigner la présentation. L'évaluation prend en considération la clarté des réponses

" Le hasard ne favorise que les esprits préparés ..."
Louis Pasteur ‡ Chimiste et Physicien Français du XIXe siècle



A vous de saisir la morale matérialisée par cette illustration !

EXO 1 (10 pts)

Considérons une particule isolée (donc ne subissant aucune force extérieure) astreinte à se déplacer sur un segment de longueur $a = 1$ (en unité de longueur).

1. Calculer puis commenter la valeur de $\sigma_E = \sqrt{\langle E^2\rangle - \langle E\rangle^2}$. La fonction d'onde normalisée décrivant l'état quantique de cette particule est donnée par :

$$\left\langle x \middle| \psi \right\rangle = \psi(x) = \left[\frac{630}{a^9}\right]^{1/2} x^2\,(a-x)^2 \qquad 0 \le x \le a \tag{1}$$

2. Déduire l'expression de $\left\langle P^2 \right\rangle$ (valeur moyenne de l'impulsion ou la quantité de mouvement) puis calculer $\sigma_P = \sqrt{\langle P^2\rangle - \langle P\rangle^2}$. Commenter
3. La fonction d'onde satisfaisant l'équation de Schrödinger dépendante du temps de la particule s'écrit selon :

$$\left|\Psi_n(x,t)\right\rangle = \psi(x)\,\exp\Big[-i\,E_n t/\hbar\Big]$$

Monter que cette solution constitue un état stationnaire de la particule en question.

Donnée de l'exercice :

$$\int_0^1 x^m\,(1-x)^n\,dx = \frac{m!\,n!}{(m+n+1)!} \tag{2}$$

EXO 2 (4 pts)

Dans le cadre de la méthode des variations, nous désirons estimer l'énergie de l'état fondamental de l'atome d'hydrogène en postulant la fonction d'essai suivante :

$$\tilde{\psi}_\alpha(r) = r^2\,e^{-\alpha\,r} \tag{3}$$

L'hamiltonien du système est établi en considérant la partie radiale du Laplacien exprimé en coordonnées sphériques :

$$\Delta_r = \frac{1}{r^2}\,\frac{\partial}{\partial r}\left[r^2\,\frac{\partial}{\partial r}\right] \tag{4}$$

– Écrire $\left\langle \tilde{\mathrm{E}}_\alpha \right\rangle$ en fonction du paramètre variationnel.

On donne :

$$I_n(\alpha) = \int_0^{+\infty} r^n \, e^{-\alpha\, r} \, dr = \frac{n!}{\alpha^{n+1}} \tag{5}$$

$$\left\langle \tilde{\mathrm{E}}_\alpha \right\rangle = \frac{\left\langle \tilde{\psi}_\alpha \middle| \hat{\mathrm{H}} \middle| \tilde{\psi}_\alpha \right\rangle}{\left\langle \tilde{\psi}_\alpha \middle| \tilde{\psi}_\alpha \right\rangle} \tag{6}$$

EXO 3 (6 pts)

Une particule est confinée (ou "emprisonnée") dans une boite unidimensionnelle de longueur a. La particule se meut dans un potentiel dont l'expression est donné par :

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & x < 0 \\ V_0\,(a - x) & 0 \le x \le a/2 \\ V_0\, x & a/2 \le x \le a \\ V_0 & x > a \end{cases} \tag{7}$$

1. Tracer avec le maximum de détails possibles, le profil théorique de $V(x)$.
2. Écrire l'hamiltonien du système.
3. Calculer la correction au premier ordre de l'énergie fondamentale.

On donne :

$$\left\langle x \middle| \varphi_n \right\rangle = \varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \, \sin\left(\frac{n\,\pi\,x}{a}\right) \qquad \forall n \in \mathbb{N}^* \tag{8}$$