Travaux Dirigés n⁰2

Exercice 01

Pour étudier l'hydrogène dans son état fondamental, on choisit la fonction sur la base $\psi_{1s}(r)$ telle que :

$$\psi_{1s}(\alpha) = \sqrt{\frac{\alpha^3}{\pi}} \exp(-\alpha r)$$

1. Calculer l'énergie cinétique.
2. Calculer l'énergie d'attraction nucléaire.
3. Déduire l'énergie totale de l'hamiltonien **H**.
4. Pour quelle valeur de α, l'énergie est-elle minimale ?

Exercice 02

Pour étudier l'hydrogène dans son état fondamental, on choisit la fonction d'essai $\psi(\alpha)$ telle que :

$$\Psi(\alpha) = \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{3/4} \exp(-\alpha r^2)$$

1. Calculer l'énergie moyenne en fonction de α, où $V(r) = -\frac{1}{r}$.
2. Pour quelle valeur de α, l'énergie est-elle minimale ? On donne :

1- $\Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial}{\partial r}\right)$, 2- $\int_0^\infty r^{2n} e^{-ar^2} dr = \frac{1\times 3\times 5\times \dots \times (2n-1)}{2^{n+1}}\sqrt{\frac{\pi}{a^{2n+1}}}$, 3- $\int_0^\infty r e^{-ar^2} dr = \frac{1}{2a}$

Exercice 03

I) On considère la fonction $\Psi_0^0(x)$, la résolution de l'équation de Schrödinger d'un oscillateur harmonique à l'état stationnaire (l'état fondamental) selon une dimension :

$$\Psi_0^0(x) = N.\exp\left(-\frac{m.w}{2\hbar}.x^2\right)$$

1. Déterminer le facteur de normalisation de la fonction $\Psi_0^0(x)$
2. Ecrire l'équation de Schrödinger d'un oscillateur harmonique, où $\hat{V}(x) = \frac{1}{2}.m.w^2..x^2$
3. Donner l'expression analytique de l'énergie qui correspond cet état du système.

II) L'opérateur hamiltonien d'un oscillateur anharmonique est définit comme suit :

$$H = H_0 + H_1 = H_0 + x^4$$

1. Calculer la correction d'énergie au premier ordre d'un niveau non-dégénéré.
2. Déduire l'énergie totale

On donne **:** $\int_0^\infty x^{2n} e^{-\alpha x^2} dr = \frac{1\times 3\times 5\times \dots \times (2n-1)}{2^{n+1}}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha^{2n+1}}}$ Les énergies accessibles par l'oscillateur sont : $E_n = \hbar.w.\left(n+\frac{1}{2}\right)$ avec ***n*** entier positif ou nul