Université M[ed] Khider de Biskra
Faculté des Sciences Exactes et Science de la Nature et de la Vie
1[ère] Master Chimie des Matériaux, Module : C.Q.2

Année universitaire : 20/2021
Département des sciences de la matière
Enseignant : Y. Boumedjane

Travaux Dirigés n⁰1

Exercice 01

Dans un problème à une dimension, une particule est décrite à l'instant t=0 par la fonction d'onde :

$\Psi(x) = N \exp\left(-\frac{|x|}{a}\right)$,   Où **a** est une constante réelle.

(1) Calculer N ?

(2) Donner les dimensions des constantes a et N.

(3) Quelle est la probabilité de mesurer la particule entre -a/2 et +a/2 ?

(4) Calculer les valeurs moyennes $<x^2>$ et <V(x)>, où $\hat{V}(x) = -{}^{1}\!/_{x}$. On rappelle que : $\int_0^{\infty} x^n e^{-\alpha x} dr = \frac{n!}{(\alpha)^{n+1}}$

Exercice 02

On se propose d'étudier le problème de la boite de potentiel rectiligne sur un axe **x'ox** de longueur **[0,L]** où **v(x)=0**.

1. Représenter le système par un schéma descriptif.
2. Ecrire l'hamiltonien du système.
3. Etablir l'équation de Schrödinger.
4. Enoncer les différentes étapes de calcul des énergies et des fonctions d'états de ce système, on insistera sur l'introduction de la quantification de l'énergie.
5. Etudier la variation de la probabilité de présence de la particule en fonction de **x** à l'état fondamental. En déduire la position probable de la particule.
6. Le système est constitué d'un électron dans une boite de longueur **L=2Å**.
   - Calculer la vitesse de l'é à l'état fondamental, ainsi que la longueur d'onde de De Broglie qui lui est associée.
7. Représenter graphiquement les fonctions **ψ** et $\boldsymbol{\psi^2}$ correspondantes à **n=1, 2** et **3**.

Exercice 03

On considère la fonction $\Psi_1(x)$, la résolution de l'équation de Schrödinger d'une particule libre à l'état stationnaire : $\Psi_1(x) = N \sin\left(\frac{\pi}{L}\right).x$

1. Déterminer le facteur de normalisation de la fonction $\Psi_1(x)$
2. Ecrire l'équation de Schrödinger d'une particule libre.
3. Déterminer les valeurs propres du système dans cet état.
4. Calculer les valeurs moyennes <x> et $<P_x>$.
5. Etudier et tracer la courbe de la densité de probabilité de présence de la particule ($D(x) = \frac{dP}{dx}$) en fonction de x. En déduire la position probable de la particule.

On donne : $\sin^2\left(\frac{n.\pi}{L}\right).x = \frac{1}{2}\left(1 - \cos\left(\frac{2.n.\pi}{L}\right).x\right)$

Exercice 04

On considère la fonction $\Psi_0(x)$, la résolution de l'équation de Schrödinger d'un oscillateur harmonique à l'état fondamental (l'état stationnaire) selon une dimension : $\Psi_0(x) = N \exp\left(-a.x^2\right)$

1. Déterminer le facteur de normalisation de la fonction $\Psi_0(x)$
2. Calculer l'énergie moyenne en fonction de α, où $\hat{V}(x) = {}^{1}\!/_{2}\, k.x^2$.
3. Pour quelle valeur de α, l'énergie est-elle minimale ? On donne :

$$\int_0^{\infty} x^{2n} e^{-\alpha x^2} dr = \frac{1 \times 3 \times 5 \times .... \times (2n-1)}{2^{n+1}} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha^{2n+1}}}$$