

**M2R MA**  
**Des modèles quantiques à la matière condensée,**  
**Partie I**

Examen — 1ère session 2008–2009  
19 décembre 2008 — 2 heures

---

Ce sujet comporte deux pages.  
Tous les documents sont autorisés.  
On peut faire référence sans démonstration à des résultats obtenus en cours.

---

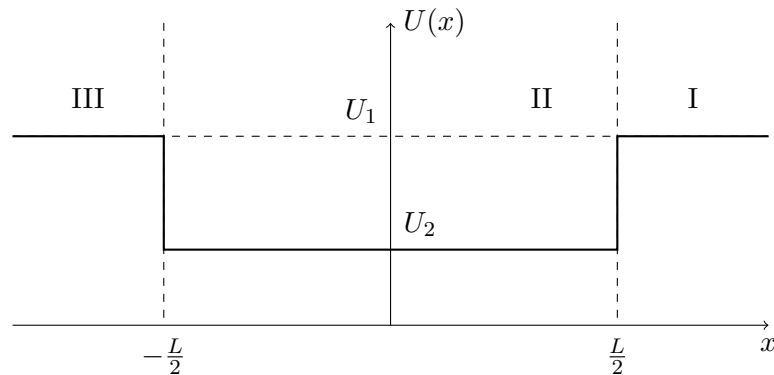
**Problème 1 : Puits symétrique**

**Questions**

1. Rappeler ce qu'est un état stationnaire de l'équation de Schrödinger.
2. On considère le potentiel

$$U(x) = \begin{cases} U_1 & \text{si } x > \frac{L}{2}, \\ U_2 & \text{si } -\frac{L}{2} < x < \frac{L}{2}, \\ U_1 & \text{si } x < -\frac{L}{2}, \end{cases}$$

avec  $U_2 < U_1$ .



Que se passe-t-il quand l'énergie renormalisée  $\varepsilon$  des solutions de l'équation de Sturm–Liouville est inférieure à  $U_2$  ?

3. Donner la forme des solutions dans le cas où  $U_2 < \varepsilon < U_1$  et déterminer le nombre de valeurs propres en fonction de  $K = \sqrt{U_1 - U_2}$ .
4. Dans le cas où  $\varepsilon > U_1$ , donner la forme des solutions correspondant à une onde incidente venant de  $+\infty$ . Déterminer la valeur du coefficient de transmission et dire quand la transmission est totale.

## Problème 2 : Chimie quantique de H<sub>2</sub>

Nous allons spécifier la modélisation en chimie quantique pour l'atome d'Hydrogène H<sub>2</sub> qui est constitué de deux noyaux identiques de charge +1 et de masse  $m$  et de deux électrons (nous utilisons ici les unités atomiques).

### **Questions**

1. Donner la forme de l'Hamiltonien de l'équation de Schrödinger pour cette molécule.
2. Expliciter le problème de recherche de l'état fondamental dans le cadre de l'approximation de Born-Oppenheimer, en rappelant les hypothèses qui sont faites.
3. Que devient le problème de  $N$ -représentabilité ?
4. Expliquer et donner l'approximation Restricted Hartree-Fock pour le problème électronique.