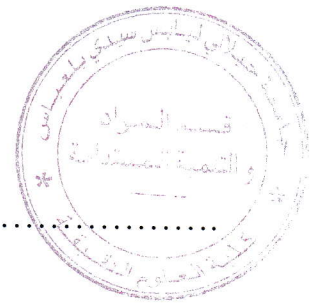


Corrigé Type



Nom : ..... Prénom : .....

UDL de Sidi Bel Abbes

Sidi Bel Abbes, le 18/01/2023

Faculté des Sciences Exactes

Département MDD

Master I Nano-Physique

Module : Méthodes de calculs en physique des matériaux 1

**EXAMEN SEMESTRE I**

- 1-L'état physique d'une particule quantique est parfaitement défini par sa fonction dérivée  Vrai ou  Faux
- 2-L'approche de la densité locale est fondée sur le modèle du gaz uniforme d'électron et forme l'approche la plus simple pour exprimer l'énergie d'échange-corrélation. Celle-ci est décrite comme :  $E_{xc}[n] = \int n(r)dr$   Vrai ou  Faux
- 3-L'approche LDA se fonde sur le modèle du gaz d'électrons et suppose par conséquent une densité électronique uniforme.  Vrai ou  Faux
- 4-la première expérience (Davisson-Germer) Bell labs New York (société de téléphonie) faite pour déterminer la structure d'un matériau à base de Fer.  Vrai ou  Faux
- 5-D'après Planck les échanges d'énergie entre la lumière et la matière sont impossibles  Vrai ou  Faux
- 6-La densité électronique est donnée par la relation  $n(r) = 2 \sum_i \Psi_i^*(r)$   Vrai ou  Faux
- 7-L'énergie de l'état fondamental de l'équation de Schrödinger est une fonctionnelle unique de la densité électronique  Vrai ou  Faux
- 8-La densité d'électron qui minimise l'énergie de la fonctionnelle globale est la vraie densité électronique est la densité électronique vraie correspondant à la solution complète de l'équation de Schrödinger.  Vrai ou  Faux
- 9-La fonctionnelle d'échange et de corrélation est une mesure à quel point le mouvement d'un électron est influencé par la présence de tous les autres électrons  Vrai ou  Faux
- 10- Le potentiel d'échange et de corrélation est donné par l'équation :  $V_{xc}(\vec{r}) = \frac{\delta E_{xc}(\vec{r})}{\delta}$   Vrai ou  Faux
- 11-L'énergie de l'approximation de la densité locale est donnée par l'équation :  $E_{xc}^{LDA} = \int n(\vec{r})\epsilon_{xc}(n) d\vec{r}$   Vrai ou  Faux