

12- La LDA donne des longueurs de liaison et donc les géométries des molécules et des solides généralement avec une précision étonnante de 1%  Vrai ou  Faux

13-La densité de probabilité s'exprime par :  $\int d\tau |\psi(r,t)|^2 = 2$   Vrai ou  Faux

14-L'approximation LSDA permet de résoudre les problèmes liés au semi-conducteurs à gap direct.  Vrai ou  Faux

15-La contribution provenant de l'échange électronique dans l'approximation de la densité locale est connue et provient de la fonctionnelle d'énergie d'échange formulée par Dirac  Vrai ou  Faux

16-Les méthodes dites GGA (Generalized gradient approximation), quelquefois aussi nommées méthodes non locales, ont été développées de façon à prendre en compte cette variation de la densité en exprimant les énergies d'échanges et de corrélation selon la densité mais également de son gradient (c'est-à-dire sa dérivée première).  Vrai ou  Faux

17-On ne peut connaître l'état d'un système quantique avant de l'avoir mesuré.  Vrai ou  Faux

18-Un quantum matériel confiné n'admet pas une énergie minimale non nulle appelée énergie cinétique minimale de confinement.  Vrai ou  Faux

19-Les électrons des couches supérieures des atomes sont facilement arrachables à cause de l'effet des ondes électromagnétiques.  Vrai ou  Faux

20-L'équation de Schrödinger peut être une conséquence d'un champ magnétique se propageant dans une direction de l'espace défini par l'équation de d'Alembert.  Vrai ou  Faux

**Question** : comment peut-on déterminer l'état fondamentale d'un système à l'aide des calculs numériques.

*optimisation de l'énergie totale en fonction du volume.*

Bon courage