



UAC/FAST

Année Académique: 2019-2020

Examen de chimie quantique (L3-Physique Fondamentale/L3-Chimie Fondamentale)

Durée : 02 heures

Exercice 1 :

Le puits semi-infini et l'approximation harmonique sont deux modèles pour étudier les niveaux de vibration d'une molécule diatomique.

Pour chacun des deux modèles dire ce qui le rapproche du potentiel exact et son insuffisance.

Quel modèle permet de prendre en compte les insuffisances des deux autres modèles ?

Faire une représentation graphique des trois modèles.

Exercice 2 :

1- Calculer les niveaux d'énergie du système- π dans l'octatétrène C_8H_{10} en utilisant le modèle de la boîte à une dimension. Pour calculer la largeur de la boîte on suppose que la molécule est linéaire et que les longueurs des liaisons $C=C$ et $C-C$ sont respectivement 135 pm et 154 pm.

2- Quelle est la longueur d'onde de la lumière requise pour induire la transition de l'état fondamentale au premier état excité ?

On donne : $C=2,998.10^8 \text{ m.s}^{-1}$; $h=6,626.10^{-34} \text{ J.s}$; $m_{\text{electron}}=9,109.10^{-31} \text{ kg}$

Exercice 3 :

Considérons l'électron de l'atome d'hydrogène dans un état excité 2s

1- La fonction d'onde correspondante à l'orbitale 2s est-elle une fonction propre de :

- a) l'opérateur énergie cinétique?
- b) l'opérateur énergie potentielle?

2- Calculer la valeur moyenne de :

- a) l'énergie cinétique ;
- b) l'énergie potentielle.

3- A quel point la densité de probabilité de cette électron dans l'orbitale 2s est-elle maximale?

4- En admettant que le diamètre du noyau de H est de 2.10^{-15} m , calculer la probabilité totale de trouver l'électron sur le noyau s'il occupait l'orbitale 2s.

Données : $\psi_{200}(r) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-r/2a_0}$; $a_0 = 0,053 \text{ nm}$; $\int_0^{\infty} x^n e^{-ax} dx = n!/a^{n+1}$