

LICENCE DE CHIMIE L3S5 CH + CP. EPREUVE DE CHIMIE QUANTIQUE

Juin 2009. Durée : 1H30 **Seul document autorisé: table de caractères *non annotée***

I. Questions de cours

- 1- Le rayonnement du corps noir: expliquer brièvement.
- 2- A quoi est due la couleur "rouge" des carottes ?
- 3- Effet photoélectrique: expliquer brièvement.
- 4 - Pourquoi ne sommes - nous pas "brulés" par l'oxygène de l'air ?

II. L'atome d'hydrogène dans son état fondamental

On rappelle l'expression de la fonction d'onde $\Psi_{1s} = (1/\pi^{1/2}) \exp(-r)$.

- 1- Quel est le système d'unités utilisé ? Comment le définit-on ?
- 2- Quelles sont les valeurs propres des opérateurs H (hamiltonien), L_z et L^2 (moment angulaires), pour la fonction Ψ_{1s} ?
- 3- Comment calculer la probabilité de trouver l'électron ~~dans~~ entre une sphère de rayons r et $r+dr$: pour $r=1$ et $dr=0.01$ ua ?
- 4- On suppose que le rayon r de l'orbitale $1s$ est connu avec une précision de 10^{-5}\AA . Quelle serait l'incertitude sur la vitesse de l'électron ? Commentaire ?
- 5- Quel est le terme atomique pour l'atome H dans l'état Ψ_{1s} ?

III. Particule sur un segment. ** Répondez brièvement **

Un electron de masse m se déplace "librement" sur un segment OL de longueur L , sur l'axe xx' .

- 1- Ecrire l'équation de Schrödinger correspondante.
- 2- Les solutions Ψ sont de la forme générale: $\Psi_n(x) = A \cos \alpha x + B \sin \alpha x$
Quelles conditions "aux limites" doit satisfaire Ψ ?
En déduire l'expression de Ψ (non normée) et des énergies E_n .
- 3- Quelles sont les valeurs possibles du nombre quantique n ?
- 4- Dessiner les fonctions d'onde des 3 premiers états.

.. TSVP ..

IV - OM de l'éthylène C_2H_4

- 1 - Quel est l'ordre de grandeur de la distance CC ? CH ? De l'énergie de liaison CC ?
- 2- Quel est le groupe de symétrie de l'éthylène ?
- 3- On décrit les OM de *valence* de l'éthylène dans l'approximation OM = CLOA, à partir d'une base « minimale » d'OA.
Quel est le nombre total d'OA ? d'OM ? d'OM de valence occupées ? d'OM vacantes ?
- 4- On veut construire uniquement les OM contenant les fonctions h_i ($= 1s H_i$, $i = 1 \text{ à } 4$):
dessiner ces 4 combinaisons, en précisant leur "symétrie".

Constantes physiques. $e = 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ C}$; $\hbar/2\pi = 1,05459 \cdot 10^{-34} \text{ J.s}$;
 $m_e = 9,109 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$; $m_{\text{proton}} = m_{\text{neutron}} = 1836 m_e$;
 $4\pi\epsilon_0 = 1,113 \cdot 10^{-10} \text{ J}^{-1} \cdot \text{C}^2 \cdot \text{m}^{-1}$; $c = 2,998 \cdot 10^8 \text{ ms}^{-1}$.
 $N_A = 6,022 \cdot 10^{23} \text{ mole}^{-1}$; $1 \text{ cal} = 4,18 \text{ J}$