3ème chimiopharmaceutique Corrigé Type (Modelisation Moleculaire)
Contrôle

EXO 1 (7.5p) (0,75 x 10)

1- (Vrai)

2- (Vrai)

3- (Faux) (La relativité generale s'interesse au monde macroscopique)

4- (Vrai)

5- (Faux) La modelisation analogique à construire un systeme physique qui reproduit plus ou moins un phénomene que l'on souhaite etudier.

6- (Faux) (les methodes quantiques, qui font appel sur l'approximat de Bron-Oppenheimmer selon la quelles la distribution des electro repartis en orbitales autours des molecules.

7- (Vrai)

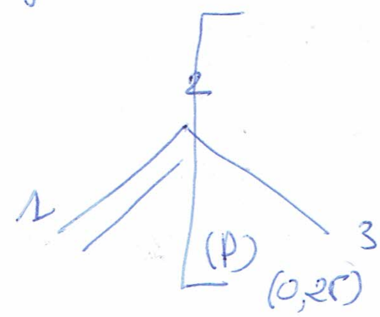
8 (Faux) Dans la molecule (C_2), les orbitales (σ) et (π) antiliantes sont vacantes.

9 -(Faux)(Pour obtenir un OM(σ), il faut faire intergir une orbitale (2S) et une orbitale ($2P_z$) d'un autre.

10 - (Vrai)

EXO 2 (12,5 points)

On considere le sys de l'allyle ($C_3H_3^{\circ}$)



1) systeme de (3ē π) (0,25)

2) les determinants

- en fonction (H_{ii}, H_{ij}, S_{ii}, S_{ij} et E)

$$\begin{vmatrix} H_{11}-ES_{11} & H_{12}-ES_{12} & H_{13}-ES_{13} \\ H_{21}-ES_{21} & H_{22}-ES_{22} & H_{23}-ES_{23} \\ H_{31}-ES_{31} & H_{32}-ES_{32} & H_{33}-ES_{33} \end{vmatrix} = 0 \quad 01$$

- en fonction (α, β) - en fonction (x, zero)

$$\begin{vmatrix} \alpha-E & \beta & 0 \\ \beta & \alpha-E & \beta \\ 0 & \beta & \alpha-E \end{vmatrix} = 0 \quad 01 \quad \Rightarrow \quad \begin{vmatrix} x & 1 & 0 \\ 1 & x & 1 \\ 0 & 1 & x \end{vmatrix} = 0 \quad 01$$

4) Determiner l'equation de 3ème ordre

a) $x\begin{vmatrix} x & 1 \\ 1 & x \end{vmatrix} - 1\begin{vmatrix} 1 & 1 \\ 0 & x \end{vmatrix} + 0\begin{vmatrix} 1 & x \\ 0 & 1 \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow (x^3 - 2x) = 0 \Rightarrow x(x^2-2) = 0$

1,0

b) les solutions x_1, x_2 et x_3 :

$x_1 = -\sqrt{2}$, $x_2 = 0$, $x_3 = +\sqrt{2}$

1,5

5) Calculez en fonction (α, β)

0,75

$$\begin{cases} E_1 = \alpha + \sqrt{2}\beta \\ E_2 = \alpha \\ E_3 = \alpha - \sqrt{2}\beta \end{cases}$$

6) Determiner les expressions des fonctions d'ondes. 0,75

$\psi_1 = C_1\varphi_1 + C_2\varphi_2 + C_3\varphi_3$; $\psi_2 = C_1\varphi_1 + C_2\varphi_2 + C_3\varphi_3$; $\psi_3 = C_1\varphi_1 + C_2\varphi_2 + C_3\varphi_3$

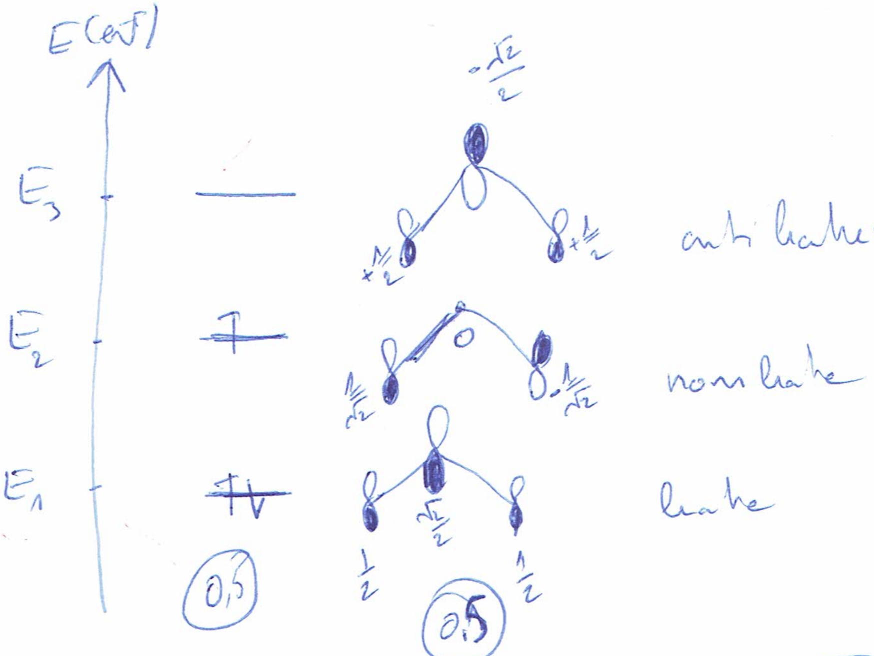
7) Calculez les Coefficients $(C_1, C_2$ et $C_3)$

$x_1 = -\sqrt{2}$; $C_1 = C_3 = \frac{1}{2}$, $C_2 = \frac{\sqrt{2}}{2} \Rightarrow \psi_1 = \frac{1}{2}(\varphi_1 + \sqrt{2}\varphi_2 + \varphi_3)$ 01

$x_2 = 0$; $C_1 = -C_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}$, $C_2 = 0 \Rightarrow \psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_1 - \varphi_3)$ 01

$x_3 = +\sqrt{2}$; $C_1 = C_3 = \frac{1}{2}$, $C_2 = \frac{\sqrt{2}}{2} \Rightarrow \psi_3 = \frac{1}{2}(\varphi_1 - \sqrt{2}\varphi_2 + \varphi_3)$ 01

8) Tracez le diagramme energetique



Σn_{π}	2	1	0	Σ
C_1^2	1/4	1/2	1/4	1
C_2^2	1/2	0	1/2	1
C_3^2	1/4	1/2	1/4	1
	1	1	1	

0,25

+ $E_{TOT}(\pi) = 3\alpha \longrightarrow$ 0,25