

Contrôle De Chimie Quantique II

Exercice 01 : Choisir celle qui correspond à la bonne réponse (système QCM) (06 pts)

- 1- Quelle méthode est utilisée pour résoudre l'équation de Schrödinger dans l'atome d'hydrogène ?
A. Méthode de perturbations B. Méthode variationnelle C. Séparation des variables
- 2- Quel principe est illustré par l'inégalité d'Heisenberg ?
A. Principe de superposition B. Principe de correspondance C. Principe d'incertitude
- 3- Qui a introduit l'idée de la dualité onde-particule ?
A. Max Planck B. Albert Einstein C. Louis de Broglie
- 4- Quelle géométrie adopte une molécule avec deux paires d'électrons autour de l'atome central ?
A. Tétraédrique B. Trigonale plane C. Linéaire
- 5- Dans l'équation de Schrödinger, que représente le potentiel $V(x)$?
A. L'énergie cinétique de la particule B. L'énergie potentielle de la particule C. La densité de probabilité
- 6- À quoi correspond la partie radiale de la fonction d'onde pour un atome d'hydrogène ?
A. À la dépendance en r du potentiel électrique. B. À la solution d'une équation différentielle pour r .
C. À une constante indépendante de r .
- 7- Dans quelle situation utilise-t-on la fonction d'onde indépendante du temps ?
A. Pour décrire des particules avec une énergie constante. B. Pour des particules à vitesse variable..
C. Pour des états excités.
- 8- Qu'est-ce qui distingue la mécanique quantique de la mécanique classique ?
A. La mécanique quantique introduit le concept de quanta d'énergie
B. La mécanique quantique étudie uniquement les particules macroscopiques..
C. La mécanique quantique ignore le principe de conservation de l'énergie.
- 9- Que représentent les nombres quantiques (n , l , m) dans la solution de l'équation de Schrödinger pour un atome d'hydrogène ?
A. n : moment angulaire total, l : moment angulaire magnétique, m : niveau d'énergie.
B. n : niveau d'énergie, l : moment angulaire total, m : moment angulaire magnétique.
C. n : moment magnétique, l : niveau d'énergie, m : moment angulaire total.
- 10- En mécanique ondulatoire, que représente la fonction d'onde $\psi(x,t)$?
A. La position exacte de la particule à un instant donné.
B. Une grandeur sans signification physique directe.
C. La densité de probabilité associée à la particule.
- 11- Quelle affirmation est correcte pour les orbitales atomiques dans la théorie quantique ?
A. Les orbitales sont des particules solides entourant le noyau.
B. Les orbitales sont des chemins fixes suivis par les électrons.
C. Les orbitales représentent des zones où la probabilité de trouver un électron est élevée
- 12- Quel est le principe fondamental de la méthode VSEPR ?
A. Les paires d'électrons de valence se repoussent pour minimiser l'énergie.
B. Les électrons de valence se regroupent pour former des liaisons fortes.
C. Les électrons se déplacent vers le centre de l'atome.

Exercice 2: (08 pts)

1- Etablir le diagramme d'orbitales moléculaire de l'ion HeH^+ sachant que l'énergie de l'orbitale atomique de $\text{He}(1\text{S}_{\text{He}})$ est plus basse que celle de $\text{H}(1\text{S}_{\text{H}})$.

2- Les expressions des deux orbitales moléculaires sont données comme suit :

$$\Psi_1 = 0,877 (1\text{S}_{\text{He}}) + 0,202 (1\text{S}_{\text{H}})$$

$$\Psi_2 = 0,798 (1\text{S}_{\text{He}}) - 1,168 (1\text{S}_{\text{H}})$$

a) Déterminer le caractère de chaque orbitale moléculaire.

b) Justifier la taille relative des coefficients dans chaque orbitale moléculaire

c) Dessiner ces deux orbitales moléculaires.

3- Sachant que ces orbitales moléculaires sont normalisées, calculer le recouvrement entre les orbitales atomiques 1S_{He} et 1S_{H}

4- Vérifier que les orbitales moléculaires Ψ_1 et Ψ_2 sont orthogonales.

Donnée : Condition de normalisée $\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle = 1$, Condition orthogonale $\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle = 0$

Exercice 3: (04 pts)

1- Construire le diagramme d'orbitales moléculaires d' O_2

2- Donner la configuration électronique d' O_2 dans son état fondamental.

-Calculer l'indice de liaison de la molécule (Cet indice est-il en accord avec le schéma de Lewis de la molécule) ?

3- La molécule d' O_2 est-elle paramagnétique ou diamagnétique d'après le diagramme d'orbitales moléculaires ? Commenter

4- Discuter de la différence entre les énergies de liaison et les longueurs de liaison des espèces suivantes :

Espèce	O_2^+	O_2	O_2^-
Énergie de liaison ($\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$)	625	494	395
Longueur de liaison (Å)	1,116	1,208	1,35

Bon Courage