

ZENDAOUI Saber mustaphachimie/Semestre 4/UEF4(O/P) Chimie Quantique/groupe 2						
Matricule	Note	Absent	Absence Justifiée	Observation	Section	Groupe
242434034319	11.25				section 1	groupe 2
242434049318	10.75				section 1	groupe 2
242434036404	10.25				section 1	groupe 2
242434081302	12.0				section 1	groupe 2
242434295001	10.5				section 1	groupe 2
242434044309	10.5				section 1	groupe 2
232334019409	15.0				section 1	groupe 2
242434023915	8.5				section 1	groupe 2
242434011912	10.0				section 1	groupe 2
242434081106	16.0				section 1	groupe 2
242434108409	10.0				section 1	groupe 2
242434071910	11.5				section 1	groupe 2
242434006104	10.25				section 1	groupe 2
242434080105	15.0				section 1	groupe 2
242434043319	11.25				section 1	groupe 2
242434036915	11.25				section 1	groupe 2
232334092803	14.0				section 1	groupe 2
242434062619	12.0				section 1	groupe 2
242434008013	10.25				section 1	groupe 2
242434023309	16.0				section 1	groupe 2
242434006717	10.5				section 1	groupe 2
242434041302	10.5				section 1	groupe 2
242434043112	11.25				section 1	groupe 2
242434060811	14.5				section 1	groupe 2
192134014021	0.0	OUI			section 1	groupe 2
242434021709	0.0	OUI			section 1	groupe 2
242434044314	10.0				section 1	groupe 2

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

--	--	--	--	--	--	--

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

--	--	--	--	--	--	--

ZENDAQUI Saber mustapha/chimie/Semestre 4/UEF4(O/P) Chimie Quantique/section 1							
Matricule	Note	Absent	Absence Justifiée	Observation	Section	Groupe	
242434057308	3.75					section 1/groupe 1	
242434042411	3.0					section 1/groupe 1	
232334022007	3.75					section 1/groupe 1	
242434041504	4.75					section 1/groupe 1	
181834013615	11.5					section 1/groupe 1	
242434036306	6.5					section 1/groupe 1	
232334034707	1.5					section 1/groupe 1	
242434044319	0.75					section 1/groupe 1	
242434044103	2.75					section 1/groupe 1	
242434062306	7.5					section 1/groupe 1	
242434062109	10.0					section 1/groupe 1	
232334044607	12.5					section 1/groupe 1	
242434006411	8.25					section 1/groupe 1	
242434048903	4.0					section 1/groupe 1	
242434052819	4.25					section 1/groupe 1	
242434048101	3.75					section 1/groupe 1	
242434023412	5.5					section 1/groupe 1	
242434080102	7.0					section 1/groupe 1	
242434069906	4.5					section 1/groupe 1	
242434063108	3.0					section 1/groupe 1	
242434053209	0.0	OUI				section 1/groupe 1	
242434048510	2.0					section 1/groupe 1	
242434072316	4.0					section 1/groupe 1	
232334059003	0.0	OUI				section 1/groupe 1	
242434034319	2.25					section 1/groupe 2	
242434049318	3.0					section 1/groupe 2	
242434036404	4.5					section 1/groupe 2	
242434081302	2.0					section 1/groupe 2	
242434295001	4.75					section 1/groupe 2	
242434044309	0.0	OUI				section 1/groupe 2	
232334019409	12.0					section 1/groupe 2	

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

--	--	--	--	--	--	--	--

Exercice I : (10 pts)

A- la fonction d'onde Ψ_{1s} de l'atome d'hydrogène est donnée par la forme analytique suivante :

$$\Psi_{1s} = N_{1s} e^{(-\alpha r)}$$

- On rappelle que l'élément de volume $d\tau$ exprimé en coordonnées sphériques s'écrit :

$$d\tau = r^2 \sin \theta \, dr \, d\theta \, d\phi$$

(r varie de 0 à l'infini, θ de 0 à π et ϕ de 0 à 2π)

- Déterminer la constante de normalisation N_{1s} .

B- Pour déterminer la plus basse énergie de l'atome d'hydrogène, nous voulons tester pour l'état fondamental, une fonction dépendant du paramètre α tel que:

$$\Psi(r) = e^{(-\alpha r^2)}$$

- 1- Ecrire l'hamiltonien du système en u.a.
- 2- Normaliser la fonction donnée.
- 3- Calculer E_1 et E_2 . (par la méthode de variation)
- 4- Pour quelle valeur de α E est-elle minimale?
- 5- c- Calculez le pourcentage d'erreur dans l'énergie E calculée.

Donnée:

$$\int_0^\infty x^n e^{-ax} dx = \frac{n!}{a^{n+1}} \quad \text{et} \quad \int_0^\infty r^{2n} e^{-\alpha r^2} dr = \frac{2n-1}{2^{n+1}} \cdot \sqrt{\frac{\pi}{\alpha^{2n+1}}} \quad , (E_{\text{exp}} = -13.6 \text{ eV} = -0.5 \text{ u.a})$$

Exercice II (6pts)

- 1- Ecrire la relation qui relie l'énergie d'un photon à fréquence, ainsi que celle qui relie l'énergie à sa longueur d'onde. sa longueur d'onde.
- 2- Quelle énergie est mise en jeu par un système émettant une radiation lumineuse de **4000 Å** (violet), de **7500 Å** (rouge).
- Donner la réponse en joules, en (**eV**), en (**cm⁻¹**).
- 3- Quelle serait l'énergie mise en jeu si le système absorbait radiation de **4000 Å**, une radiation de **7500 Å**?

Rq : Suite à la page 2

Exercice III (04 pts)

Q1- En physique du solide, que permet d'expliquer l'équation de Schrödinger selon le document ?

- A. Les bandes d'énergie dans les cristaux et le fonctionnement des diodes laser.
- B. La couleur des métaux uniquement.
- C. Uniquement la conduction thermique classique.
- D. La gravité au sein des réseaux cristallins

Q2- Quelle valeur a été fixée pour la constante de Planck h depuis 2019 ?

- A. $6,62607015 \times 10^{-34}$ J.s
- B. $6,6260 \times 10^{-31}$ J.s
- C. $1,05 \times 10^{-31}$ J.s
- D. $1,054 \times 10^{-34}$ J.s

Q3- Parmi les postulats de la mécanique quantique, lequel est spécifiquement associé à l'évolution temporelle ?

- A. Le postulat 6 (Équation de Schrödinger).
- B. Le postulat 4 (Règle de Born).
- C. Le postulat 3 (Quantification).
- D. Le postulat 1 (Laplacien).

Q4- Quelle information fournit la partie 'harmonique sphérique' $Y_{lm}(\theta, \phi)$ de la fonction d'onde ?

- A. Des informations sur l'orientation et la localisation angulaire de l'électron autour du noyau.
- B. L'énergie totale du niveau n .
- C. La masse réduite du système proton-électron.
- D. La position de l'électron en termes d'éloignement radial uniquement.

Q5- Pourquoi les diagrammes d'OM des molécules hétéronucléaires (comme CO ou HF) présentent-ils une asymétrie ?

- A. À cause de l'absence totale d'orbitales antiliantes.
- B. Parce que les orbitales atomiques des deux atomes n'ont pas la même énergie initiale.
- C. À cause de la différence de masse entre les deux noyaux.
- D. Parce qu'elles ne peuvent former que des liaisons de type sigma.

Q6- Qu'est-ce qui caractérise physiquement une orbitale moléculaire 'antiliante' (σ^* ou π^*) ?

- A. La présence d'un nœud (zone de densité nulle) entre les noyaux.
- B. Elle localise l'électron sur un seul atome sans influencer la stabilité.
- C. Une densité électronique maximale entre les deux noyaux.
- D. Une énergie égale à celle des orbitales atomiques initiales.

Bon chance

Corrigé Type « Chimie Quantique I »

Exo 1 (10 pts)

A. Déterminer la constante de Normalisation « N_{1s} » (0,3)

$\Psi_{1s} = N_{1s} e^{-\alpha r}$ et Condition de normalisation: $\int \Psi_{1s} \cdot \Psi_{1s}^* d\tau = 1$

$\Rightarrow N_{1s}^2 \int_0^\infty e^{-2\alpha r} r^2 dr \cdot \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi = 1$ (0,5)
 ou $\iiint_{\mathbb{R}^3} \Psi_{1s}^2 d\tau = 1$ (0,5)
 la partie angulaire $\left\{ \int_0^\pi \sin\theta d\theta \cdot \int_0^{2\pi} d\phi = 4\pi \right.$

$\Rightarrow$ selon l'intégrale de référence $\int_0^\infty r^n e^{-\alpha r} dr = \frac{n!}{\alpha^{n+1}} \quad \left\{ \begin{array}{l} n=2 \\ \alpha=2\alpha \end{array} \right.$

$\Rightarrow \int_0^\infty r^2 \cdot e^{-2\alpha r} dr = \frac{2!}{(2\alpha)^3} = \frac{2}{8\alpha^3} = \frac{1}{4\alpha^3}$ (0,5)

$N_{1s}^2 \int_0^\infty r^2 e^{-2\alpha r} dr \cdot \int_0^\pi \sin\theta d\theta \cdot \int_0^{2\pi} d\phi \Rightarrow N_{1s}^2 \times \frac{1}{4\alpha^3} \cdot 4\pi = 1 \Rightarrow N_{1s}^2 = \frac{\alpha^3}{\pi} \Rightarrow N_{1s} = \sqrt{\frac{\alpha^3}{\pi}}$ (0,4) (0,5)

B. la fonction d'onde: $\Psi(r) = e^{-\alpha r^2}$ (2,5) = 1+2

1) Ecrire l'hamiltonien (u.a.):

(0,5) $\hat{H} = -\frac{1}{2} \nabla^2 - \frac{1}{r} \quad \left(\nabla^2 = \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right)$

2) Normaliser la fonction d'onde:

$\int \Psi^2 d\tau = 1 \Rightarrow \iiint_{\mathbb{R}^3} N^2 e^{-2\alpha r^2} \cdot 4\pi r^2 dr = 1$ (0,25) (0,25) $d\tau = 4\pi r^2 dr$

$\Rightarrow N^2 \int_0^\infty e^{-2\alpha r^2} \cdot 4\pi r^2 dr \Rightarrow \int_0^\infty r^2 e^{-\alpha r^2} dr = \frac{1}{4\alpha} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \Rightarrow \alpha = 2\alpha$ (0,5)

$\Rightarrow N^2 \cdot 4\pi \left(\frac{1}{4(2\alpha)} \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} \right) = N^2 \left(\frac{\pi}{2\alpha} \right)^{\frac{1}{2}} \cdot \left(\frac{\pi}{(2\alpha)} \right) \Rightarrow 1 \Rightarrow N = \left(\frac{2\alpha}{\pi} \right)^{\frac{3}{4}}$

$N = \left(\frac{2\alpha}{\pi} \right)^{\frac{3}{4}} \Rightarrow \Psi_{1s} = \left(\frac{2\alpha}{\pi} \right)^{\frac{3}{4}} \cdot e^{-\alpha r^2}$ (0,5)

3) Calculer l'énergie $E(\alpha)$ (2,0)

$E = \langle \Psi | H | \Psi \rangle$ (l'énergie de variationnelle) (0,5)

$$E = \langle \Psi | H | \Psi \rangle \Rightarrow \begin{cases} H = T + V \\ T = \langle \Psi | \frac{1}{2} \nabla^2 | \Psi \rangle \rightarrow \text{Cinétique} \\ V = \langle \Psi | -\frac{1}{r} | \Psi \rangle \rightarrow \text{potentielle} \end{cases} \quad (0,5)$$

$$\Rightarrow \langle T \rangle = \langle \Psi | -\frac{1}{2} \nabla^2 | \Psi \rangle = \frac{3\alpha}{2} \quad \text{et} \quad \langle V \rangle = \langle \Psi | -\frac{1}{r} | \Psi \rangle = -2\sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}} \quad (0,25)$$

Donc l'énergie : $E(\alpha) = \frac{3\alpha}{2} - 2\sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}}$ (0,5)

4) Valeur de α pour laquelle E est minimale (1,5)

$$\frac{dE(\alpha)}{d\alpha} = 0 \Rightarrow \frac{3}{2} \cdot \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cdot \frac{1}{2\sqrt{\alpha}} = 0 \Rightarrow \frac{3}{2} - \sqrt{\frac{2}{\pi}} \cdot \frac{1}{2\sqrt{\alpha}} = 0 \Rightarrow \alpha_{\min} = \frac{8}{9\pi} \approx 0,283 \text{ u.a.} \quad (0,25)$$

$$\alpha_{\min} \approx 0,283 \text{ u.a.} \quad (0,25)$$

• en remplaçant $\alpha_{\min}$ dans $E(\alpha)$

$$E_{\min} \approx -\frac{4}{3\pi} \approx -0,424 \text{ u.a.} \Rightarrow E_{\min} = -0,424 \text{ u.a.} \quad (0,25)$$

5) Calculer le pourcentage d'erreur (1,0)

$$E_{\text{exp}} = -0,5 \text{ u.a.}, \quad E_{\text{calculé}} = -0,424 \text{ u.a.}$$

$$E_{\text{err}}(\%) = \left| \frac{E_{\text{exp}} - E_{\text{calculé}}}{E_{\text{exp}}} \right| \times 100 = \left| \frac{-0,5 + 0,424}{-0,5} \right| \times 100 = 15,2\% \quad (0,5)$$

$$E_{\text{err}}(\%) = 15,2\% \quad (0,5)$$

1) Ecrire les relations qui relient l'un photo et fréquence :

• l'énergie en fonction de fréquence :

$$E = h \cdot \nu$$

$$c = 3 \cdot 10^8 \text{ m/s}$$

$$h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J.s}$$

• l'énergie en fonction de la longueur d'onde : $1 \text{ eV} = 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ C}$

$$E = \frac{h \cdot c}{\lambda}$$

$$1 \text{ Å} = 10^{-10} \text{ m} = 10^{-8} \text{ cm}$$

2) l'énergie est mise en jeu par un sys émettant et radiaction

Radiaction violette ($\lambda = 4000 \text{ Å}$)

$$E = \frac{h \cdot c}{\lambda} = \frac{6,602 \cdot 10^{-34} \cdot 3 \cdot 10^8}{\lambda \cdot 10^{-10}}$$

Radiaction ($\lambda = 4000 \text{ Å} = 4 \cdot 10^{-7} \text{ m}$)

$$E = \frac{6,602 \cdot 10^{-34} \cdot 3 \cdot 10^8}{4 \cdot 10^{-7}} = 4,951 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$

$$E \approx 3,10 \text{ eV}$$

Radiaction

$$\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda} = \frac{1}{4000 \cdot 10^{-8}} = 25000 \text{ cm}^{-1}$$

Radiaction ($\lambda = 7500 \text{ Å}$)

$$E = \frac{6,602 \cdot 10^{-34} \cdot 3 \cdot 10^8}{7,5 \cdot 10^{-7}} = 2,64 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$

$$E = 1,65 \text{ eV}$$

$$\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda} = \frac{1}{7500 \cdot 10^{-8}} = 13333,3 \text{ cm}^{-1}$$

3) Energie en Cas : $\Delta E = E_2 - E_1$

• Emission : le sys perd de l'énergie ($\Delta E < 0$)

• Absorption : le sys gagne de l'énergie ($\Delta E > 0$)

$$\Delta E = 3,10 - 1,65 = +1,45 \text{ eV} \quad \Delta E > 0 \text{ (Absorption)}$$

$$\Delta E = 1,65 - 3,10 = -1,45 \text{ eV} \quad \Delta E < 0 \text{ (Emission)}$$

Exer 03 (PK 04) (0, 75 x 6)

1) $Q_1 \longrightarrow A$

2) $Q_2 \longrightarrow A$

3) $Q_3 \longrightarrow A$

4) $Q_4 \longrightarrow A$

5) $Q_5 \longrightarrow B$

6) $Q_6 \longrightarrow A$