Université El oued
Faculté des sciences exacte
Département de chimie
2eme année

2017/2018

Module : chimie théorique

Question de cours :(10pts)

Sélectionner la bonne réponse

1)-La longueur d'onde d'un particule selon le postulat de luis de Broglie est

a) $\lambda = hp$

b) $\lambda = \frac{h}{2\pi p}$

c) $\lambda = \frac{h}{mc}$

d) $\lambda = \frac{h}{p}$

2)-la condition de normalisation est

a) $\int \Psi\Psi^* dv = 1$

b) $\int \Psi\Psi^* dv = 0$

c) $\int \Psi\Psi^* dv = N$

3)- On considere une particule dans une boite de potentiel unidimensionnelle Quelles sont les condition aux borne

Exercice N1 :(6pts)

1. $f(x) = \sin(x)$ $g(x) = \cos x$;Calculer l'operateur $\hat{A}$

2. on pose la fonction $\Psi(x)$

Calculer les commutateur$[P_x, x]$ et $[\frac{d}{dx}, x]$

Exercice N2 :(4pts)

L'orbitale 1s de l'atome d'hydrogène a pour expression

$\Psi_{1s} = N_s e^{-\frac{r}{a_0}}$

r est la distance de l'électron au noyau et a_0 le rayon de l'orbite de Bohr

1. En quel point la densité de présence de l'électron 1s est-elle maximum ?

Bonne courage

2ème année Chimie — 2017/12/15

Module Chimie Théorique

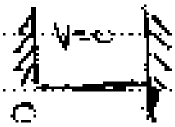
Question de Cours : 10 Pts

* La bonne réponse est :

1 ⟶ d (2)

2 ⟶ a (2)

3 : Les conditions aux bornes pour une boîte de potentiel unidimensionnelle est :

$V=\infty$  (02)

$V(x)=0 \quad 0<x<l$ (01)

$V(x)=\infty$ ailleurs (01)

$\Psi(0)=0$ (01)

$\Psi(l)=0$ (01)

Exo 1 : (6 Pts)

1. $f(x)=\sin(x)$

$g(x)=\cos(x)$

$\hat{A}f(x)=g(x)$ (01)

$\Rightarrow \hat{A}=\frac{d}{dx}$ (02)

2. Calcul des commutateurs

$[\hat{P}_x,x]\Psi(x)=\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}(x\Psi(x))-x\left(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\Psi(x)\right)$ (01)

$=\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\Psi(x)+\cancel{\frac{\hbar}{i}x\frac{d}{dx}\Psi(x)}-\cancel{x\frac{\hbar}{i}\frac{d\Psi(x)}{dx}}$

$\Rightarrow [P_x,x]\Psi(x)=\frac{\hbar}{i}\Psi(x)$

$\Rightarrow [P_x,x]=\frac{\hbar}{i}$ (01)

$\left[\frac{d^2}{dx^2},x\right]\Psi(x)=\frac{d^2}{dx^2}(x\Psi(x))-x\frac{d^2}{dx^2}\Psi(x)$ (01)

$=\frac{d}{dx}\Psi(x)+x\cancel{\frac{d^2\Psi}{dx^2}}-\cancel{x\frac{d^2\Psi}{dx^2}}$

$[\ ,\ ]\Psi(x)=2\Psi(x)=2\frac{d}{dx}$

Exo 2 : (4 Pts)

1. l'orbitale 1s de l'atome d'hydrogène

$\Psi_{1s}=N_{1s}e^{-\frac{r}{a_0}}$

N_{1s} est obtenu par normalisation

$\int\Psi_{1s}^*\Psi_{1s}\,dv=1$ (01)

$\langle\Psi_{1s}|\Psi_{1s}\rangle=1$

1s est une sphère (01)

$V=\frac{4}{3}\pi r^3 \Rightarrow dV=4\pi r^2 dr$

On tenant compte l'intégrale

$\int x^n e^{-ax}dx=\frac{n!}{a^{n+1}}\quad(a>0)$

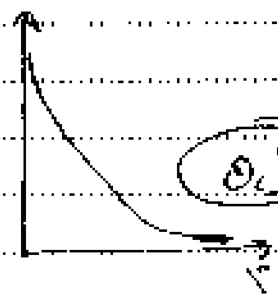
$\int\Psi_{1s}\Psi_{1s}^*\,dv=1$

$N_{1s}=\frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}$ (0.5)

Donc $\Psi_{1s}=\frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}e^{-\frac{r}{a_0}}$

2. densité de présence

$P_{1s}(r)=\Psi_{1s}^2=\frac{1}{\pi a_0^3}e^{-\frac{2r}{a_0}}$ (0.5)



(0,5)

$P_{1s}(r)$ max $\Rightarrow r=0$

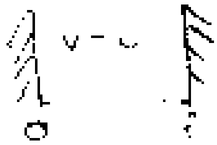
(0,5)

Département de Chimie
2ème année Chimie
Module : Chimie Quantique

Questions de cours :

1 ___ : 2
2 ___ : 2

3 Les conditions aux bornes pour une boite unidimensionnelle est :



V = 0 ; V = ∞ 2

$V(x) = 0 \quad 0 < x < L$ 1
$V(x) = \infty$ ailleurs 1
$\psi(0) = 0$ 1
$\psi(L) = 0$ 1

Ex 1 :

1. $f(x) = \sin x \quad g(x) = \cos(x)$
$A f(x) = g(x)$ 1
$\Rightarrow A = \frac{\partial}{\partial x}$ 1

2. Calcul des commutateurs :
$[P_x, x]\psi(x)$ avec $P_x = -i\hbar \frac{d}{dx}$ 1

$[P_x, x]\psi(x) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}(x\psi(x)) + x\, i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\psi(x)$

$\Rightarrow [P_x, x]\psi(x) = -i\hbar\, \psi(x)$ 1

$[\frac{d}{dx}, x]\psi(x) = \frac{\partial}{\partial x} x\psi(x) - x\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)$ 1

$\Rightarrow [\frac{d}{dx}, x]\psi(x) = 1$ 1

Ex 2 :

1. Fonction 1s de l'atome d'hydrogène.

$\psi_{1s} = N_{1s}\, e^{-\frac{r}{a_0}}$

N_{1s} est obtenu par normalisation

$\int \psi_{1s}\psi_{1s}^*\, d\tau = 1$ 1

$\langle \psi | \psi^* \rangle = 1$

Volume sphère 1
$V = \frac{4}{3}\pi r^3 \Rightarrow dV = 4\pi r^2 dr$

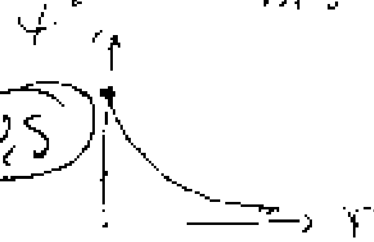
En tenant compte l'intégrale
$\int x^n e^{-ax} dx = \frac{n!}{a^{n+1}}$

$\Rightarrow N_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}$ 0,5

Donc $\psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}\, e^{-\frac{r}{a_0}}$

2. densité de présence
$P_{1s}(r) = \psi_{1s}^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}\, e^{-\frac{2r}{a_0}}$ 0,5

0,5



$P_{1s}(r)$ max $\Rightarrow r = 0$
0,5