Université de Msila
Département de Chimie
L2 chimie Quantique(F224)
N.Latelli

Série N°2

Exercice 1 : Puits de potentiel infini, Application : modélisation de la structure des électrons π des polyènes

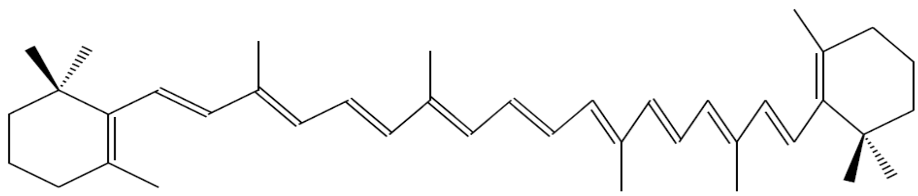
On considère une particule de masse ***m*** se déplaçant sur un segment de longueur ***L***.

1. On considère la particule comme une onde ψ de pulsation $\omega = \frac{2\pi v}{\lambda}$ où v la vitesse de propagation et la longueur d'onde de de Broglie ($\lambda = \frac{h}{p}$).

$$\psi_T = 2A sin\left(\frac{2\pi x}{\lambda}\right) cos\omega t$$

Montrer que la condition de stationnarité de l'onde implique que l'énergie soit quantifiée, et que $= \frac{n^2h^2}{8mL^2}$, avec n un nombre entier positif.

2. résoudre l'équation de Schrödinger pour la particule. Vérifier que l'on retrouve l'expression obtenue à la question précédente pour l'énergie des niveaux permis. On veut appliquer ce modèle pour décrire le système d'électrons de la molécule de - carotène (figure ci-dessous). On fait l'hypothèse que chaque électron du système de liaisons conjuguées se déplace librement sur un segment de longueur L.



3. quel est le nombre d'électrons л du système ? Sachant que chaque niveau quantique peut contenir au plus deux électrons, combien de niveaux d'énergie sont remplis dans l'état fondamental ?

4. Estimer la valeur de L pour le β-carotène.

5. Quelle est la longueur d'onde en nm pour la transition électronique de plus basse énergie ?

6. En réalité, la première transition électronique se produit pour λ=500 nm. Expliquer pourquoi le modèle choisi est trop simple.

Exercice 2

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

$$\Psi_{1S} = N_{1S} e^{-r/a0}$$

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

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

2. Quel est le rayon R de la sphère sur laquelle la densité de présence électronique est maximum ?

3. Quel est le rayon moyen de l'orbitale 1s ? Comparer ce résultat aux deux résultats précédents