وزارة التعليم العالي و البحث العلمي
جامعة ابن خلدون تيارت
كلية علوم المادة
قسم الكيمياء
السنة الثانية ليسانس كيمياء

Corrigé d'examen du Module : Chimie Quantique

Lundi le 13/05/2024

Exercice 1 :

- Le paramètre σ représente le nombre d'onde $\boxed{\sigma = \frac{1}{\lambda}}$ 0,5

- Les paramètres caractéristiques sont :
  - → Le nombre d'onde : $\boxed{\sigma = \frac{1}{\lambda}}$ 1,5 AN 1,5
  - → La longueur d'onde : λ
  - → Le module du vecteur d'onde : $\boxed{|K| = \frac{2\pi}{\lambda}}$
  - → La fréquence : $\boxed{\nu = \frac{c}{\lambda}}$
  - → La pulsation : $\boxed{W = 2\pi\nu}$
  - → La période : $\boxed{T = \frac{1}{\nu}}$

ionisation 1

Exercice 2 :

1/ photoélectrons : électrons qui sont extraits d'un matériaux par l'effet photoélectrique. 1

2/ Travail de sortie : Energie pour extraire un électron d'un matériau 1

$\boxed{W = Ee.}$

3/ D'après la relation d'Einstein : $\boxed{h\nu = W + E_c}$ 1

$\Rightarrow \boxed{E_c = h\nu - W = 2,73 - 2,33 = 0,4\ eV}$

$E_c = \frac{1}{2} m_e v^2 \Rightarrow v^2 = \frac{2E_c}{m_e} \Rightarrow \boxed{v = \sqrt{\frac{2E_c}{m_e}} = 3,74 \times 10^5\ m/s}$ 1

…nsité du courant photoélectrique I :

$$\boxed{\eta = \frac{n_e}{n_\gamma}} \quad \text{avec : } \boxed{I = n_e \cdot e} \text{ et } \boxed{P = n_\gamma \cdot h\nu}$$

Alors : $\eta = \frac{I}{e} \times \frac{h\nu}{P} \Rightarrow \boxed{I = \frac{e \cdot P \cdot \eta}{h\nu}}$

AN : $\boxed{I = 0{,}011\ A}$ 2

Exercice 3 :

A-1) Représentation graphique de la marche de potentiel :

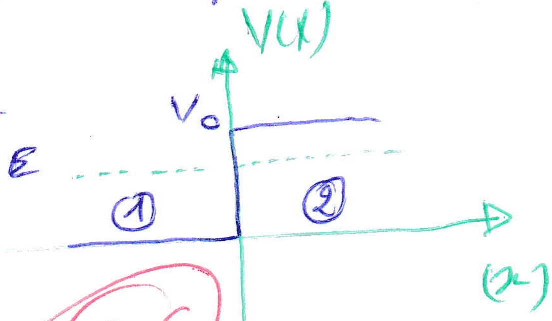

Fig : Marche de potentiel. ($E < V_0$)

A-2) L'équation de Schrödinger est donnée par :

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(x) + E_p\psi(x) = E\psi(x)}$$ 0,5

Région I : $V(x) = 0$

$$\boxed{\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi(x) = 0}$$ 1

Région II : $$\boxed{\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - (E - V_0)\psi(x) = 0}$$ 1

A-3) Les solutions sont :

$$\boxed{\psi_1(x) = A_1 e^{ik_1x} + A_1' e^{-ik_1x}}$$ 1

$$\boxed{\psi_2(x) = B_2 e^{\rho_2 x} + B_2' e^{-\rho_2 x}}$$ 1 $(B_2 = 0)$

avec : $\boxed{k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E}$ et $\boxed{\rho_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)}$

Utilisant les conditions de raccordement on obtient :

$\psi_1(0) = \psi_2(0)$ et $\psi_1'(0) = \psi_2'(0)$.

$$\boxed{\frac{A_1'}{A_1} = \frac{K_1 - i\,\rho_2}{K_1 + i\,\rho_2}} \quad \text{et} \quad \boxed{\frac{B_2'}{A_2} = \frac{2K_1}{K_1 + i\,\rho_2}}$$

Le coefficient de reflexion R vaut alors : $\boxed{R = \left|\frac{A_1'}{A_1}\right|^2 = 1}$ 1

on doit donc avoir : $\boxed{T = 0}$ 1

B-1) Un hydrogénoïde est un ion monoatomique ne possédant qu'un seul electron comme l'hydrogène (H) 0,5

B-2) $$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(r,\theta,\varphi) - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\cdot\psi(r,\theta,\varphi) = E\cdot\psi(r,\theta,\varphi)}$$ 1

* L'énergie cinetique est donnée par : $\boxed{E_c = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta}$. 1
* L'energie potentielle E_p est purement electrostatique et s'écrit :

$$\boxed{E_p = \frac{-Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}}$$ 1