LE CORRIGE DES L'EXAMEN DU MODULE PHYSIQUE NUMERIQUE.

Master1 Physique Médicale

EXERCICE 1

Opérateurs Hamiltoniens : $H = T + V$

H : Opérateur Hamiltonien
T : Opérateur Energie Cinétique
V : Opérateur Energie Potentielle

1- $T = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ Force de rappel $\vec{F} = -k.x.\vec{e_x}$ la force dérive d'un potentiel V tel que $\vec{F} = -\overrightarrow{grad}\, V$ donc $V = \frac{1}{2}kx^2 + C$: C=0 arbitrairement

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}kx^2$$

2- Particule dans le vide V=0

$$H = T = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)$$

3- Particule de charge $(-q)$ et masse m interagissant avec particule de masse M et de charge $(+q)$:

$$V = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{q^2}{\sqrt{(x_M - x_m)^2 + (y_M - y_m)^2 + (z_M - z_m)^2}}$$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_m^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_m^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_m^2}\right) - \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_M^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_M^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_M^2}\right) - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{q^2}{\sqrt{(x_M - x_m)^2 + (y_M - y_m)^2 + (z_M - z_m)^2}}$$

EXERCICE 2

On a :

$$\nu = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{m}} \quad \Rightarrow \quad k = 4\pi^2\nu^2 m$$

où ν est la fréquence et m la masse de l'oscillateur. Pour le vibrateur C–O, on peut confondre les deux fréquences, celle de l'oscillateur mécanique et celle de la molécule C–O. Par contre, on doit remplacer m par la masse réduite de la molécule μ. En SI, on obtient :

$$k = 4\pi^2 (6{,}506\ 10^{13})^2 \mu$$

$$= 39{,}48 \times 43{,}328\ 10^{26} s^{-2} \times \frac{12 \times 16}{12 + 16} \times \frac{10^{-3}\ \text{kg mol}^{-1}}{6{,}022\ 10^{23}\ \text{mol}^{-1}}$$

$$k = 39{,}48 \times 42{,}328 \times 6{,}857 / 6{,}022 = 1\ 903\ \text{kg s}^{-2}$$

$$k = 1\ 903\ \text{N}$$

Donc : $\bar{\nu} = \nu\ /c = 6.5\ 6,\ 5\text{x}10^{13} / (2{,}9979\ 10^{10}\ \text{cm/s}) = 6{,}168.83\ \text{cm}^{-1}$

Le nombre d'oscillations par seconde est justement égal à cette fréquence.

a. La constante d'anharmonicité χ_e

$$\chi_e = 0.006$$

L'énergie de dissociation (énergie de liaison) spectroscopique est l'intervalle D_e

$$D_e = \frac{\omega_e^2}{4\omega_e \chi_e} = 63260\ Cm^{-1}$$

Pour convertir ces valeurs on peut appliquer la formule suivante, en n'oubliant pas de multiplier par le nombre d'Avogadro et en introduisant un facteur 100 pour ramener les cm^{-1} en m^{-1}, une unité de base du système SI.

$$E = hc\bar{\nu}N$$

$$= 6{,}626\ 176\ 10^{-34} \times 2{,}997\ 924\ 10^{8} \times 6{,}168.83 \times 100 \times 6{,}022\ 05\ 10^{23}$$

Vérifions la cohérence des unités.

$$E = hc\bar{\nu}N$$

$$[\text{J} \cdot \text{s}]\ [\text{m} \cdot \text{s}^{-1}]\ [\text{Cm}-1]\ [\text{cm} \cdot \text{m}^{-1}]\ [\text{mol}^{-1}] = [\text{J} \cdot \text{mol}^{-1}]$$

Et on a l'énergie du point zéro : $E_0 = -((1/2 - \chi_e/4) h\nu_{osc}$

$$E_0 = 2.14\text{-}10^{-20}\ \text{J}$$

	De	D_0
Cm–1	6320	1090.26
Joul	$4.3050*10^{-20}$	$2.16*10^{-20}$
kj/mol	25.943	13.016

Pour transformer des joules en calories, il suffit de diviser par 4,18 :

$$D_e = 0{,}448\ \text{kcal/mol}$$