Nom: corrigé Numéro d'étudiant:

CHM 2730 - **Examen partiel No.1** – 8 février 2011

Durée totale de l'examen: 1 heure et 15 minutes (13h00 à 14h15)

25

Instructions: Assurez-vous d'avoir **5** pages. Si vous écrivez au crayon à papier, aucune section de l'examen ne pourra être recorrigée. Les calculatrices programmables ne sont pas permises. Veuillez inclure les unités appropriées. Si vous avez besoin de davantage d'espace, vous pouvez écrire au dos des feuilles, mais veuillez l'indiquer clairement par une flèche en bas de la page. Montrez tous les détails des calculs pour obtenir la totalité des points.

Feuille de formules: Cet examen est à **livre fermé**. Vous n'êtes pas autorisés à apporter avec vous vos propres feuilles de formules, notes, livres etc. Plusieurs pages de formules vont maintenant être distribuées pour accompagner l'examen.

1. (5 points) Écrivez des descriptions / explications / réponses concises :

(a) Quelle est la définition générale d'observables complémentaires, en fonction de leur propriétés commutatifs?

Des observables complémentaires sont des observables qui ne sont pas commutatifs:

$$\hat{\Omega}_1 \hat{\Omega}_2 \psi \neq \hat{\Omega}_2 \hat{\Omega}_1 \psi$$

(b) Qu'est-ce le principe de correspondance?

Le principe indique qu'une théorie plus compliquée devrait, dans des circonstances appropriées, pouvoir reproduire les résultats obtenus par une théorie fonctionnelle plus simple.

Ex: la mécanique classique découle de la mécanique quantique dans la limite des grands nombres quantiques.

(c) Quelle observation empirique Graham a-t-il fait concernant la vitesse d'effusion des gaz?

Il a observé que la vitesse d'effusion est inversement proportionnelle à la racine carrée de la masse molaire.

(d) Qu'est-ce que la catastrophe ultraviolette? Soyez précis.

- l'échec de la mécanique classique dans la description de la radiation du corps noir dans la limite des courtes longueurs d'ondes.

(e) Pour deux fonctions d'onde (ψ_1 et ψ_2) qui correspondent à des valeurs propres différentes d'un opérateur, écrivez les trois intégrales qui décrivent le fait que ces deux fonctions d'onde sont ***orthonormales***.

$$\int \psi_1^* \psi_1 \, dx = 1$$

$$\int \psi_2^* \psi_2 \, dx = 1$$

$$\int \psi_2^* \psi_1 \, dx = 0$$

2. **(3 points)** La vitesse d'un électron est connue avec une précision de 1,1 x 10^{-7} m s^{-1}. Quelle est l'incertitude minimale sur la position de l'électron?

$$\Delta p = m\Delta v = (9{,}10938 \times 10^{-31} \text{ kg})(1{,}1 \times 10^{-7} \text{ m s}^{-1})$$
$$= 1{,}002 \times 10^{-37} \text{ kg m s}^{-1}$$

$$\Delta p \Delta q \geq \hbar/2$$

$$\Delta q \geq \frac{\hbar}{2\Delta p} = \frac{1{,}05457 \times 10^{-34} \text{ Js}}{2(1{,}002 \times 10^{-37} \text{ kg m s}^{-1})}$$

$$= 5{,}3 \times 10^{2} \text{ m}$$

$\therefore$ L'incertitude minimale sur la position est $5{,}3 \times 10^{2}$ m.

3. **(4 points)** Utilisez la distribution de Maxwell des vitesses pour estimer la fraction de molécules de CO_2 à 27,75 °C qui a des vitesses comprises entre 245,0 et 248,1 m s^{-1}. Vous pouvez supposer que *f(v)* est constante sur cet intervalle. Masses molaires : 12,00 g mol^{-1} (carbone) ; 15,99 g mol^{-1} (oxygène).

$$\text{fraction} = F = f(v)\Delta v = \left(\frac{M}{2\pi RT}\right)^{3/2}(4\pi v^2)e^{-\frac{Mv^2}{2RT}}\Delta v$$

évaluez à $v = \frac{1}{2}(245{,}0 + 248{,}1\ \text{m s}^{-1}) = 246{,}55\ \text{m s}^{-1}$

$$F = f(246{,}55\ \tfrac{m}{s})\Delta v = \left(\frac{43{,}98\times10^{-3}\ \text{kg mol}^{-1}}{2\pi(8{,}3145\ \text{J K}^{-1}\text{mol}^{-1})(27{,}75+273{,}15\ \text{K})}\right)^{3/2}\left(4\pi\left(246{,}55\ \tfrac{m}{s}\right)^2\right)\times$$

$$\exp\left\{\frac{-(43{,}98\times10^{-3}\ \text{kg mol}^{-1})(246{,}55\ \tfrac{m}{s})^2}{2(8{,}3145\ \text{J K}^{-1}\text{mol}^{-1})(27{,}75+273{,}15\ \text{K})}\right\}\left(3{,}1\ \tfrac{m}{s}\right)$$

$$F = 0{,}65\ \%$$

∴ La fraction de molécules est 0,65 %.

4. **(3 points)** Calculer la vitesse la plus probable des molécules H_2 quand la température est de 30,1° C. Masse molaire : 1,0079 g mol^{-1} (hydrogène)

$$c^* = \sqrt{\frac{2RT}{M}} = \sqrt{\frac{2(8{,}3145\ \text{J K}^{-1}\text{mol}^{-1})(30{,}1+273{,}15\ \text{K})}{(2\times1{,}0079\times10^{-3}\ \text{kg mol}^{-1})}}$$

$$= 1582\ \tfrac{m}{s}$$

$$\doteq 1{,}58\times10^{3}\ \tfrac{m}{s}$$

5. **(6 points total)**
(a) **(3 points)** Les fonctions d'onde qui décrivent une particule dans une boîte unidimensionnelle sont présentées ci-dessous. Vérifiez que ψ(x) est normalisée (ou non). Montrez le détail du calcul pour obtenir tous les points.

(b) **(3 points)** Quelle est la probabilité, *P*, de localiser un électron entre *x* = 0 et *x* = 0,22 nm dans son état d'énergie le plus bas dans une molécule conjuguée de longueur 1,00 nm?

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin(n\pi x / L) \qquad n = 1,2,\cdots$$

(a)

$$\int_0^L \psi^* \psi \, dx = \int_0^L \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(n\pi x/L) \cdot \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(n\pi x/L) \, dx$$

$$= \frac{2}{L} \int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx$$

$$= \frac{2}{L} \left\{ \left[\frac{1}{2}(L) - \frac{1}{4\left(\frac{n\pi}{L}\right)} \sin\left(\frac{2n\pi x}{L}\right) \right] - \left[\frac{1}{2}(0) - \frac{1}{4\left(\frac{n\pi}{L}\right)} \sin(0) \right] \right.$$

$$= \frac{2}{L} \cdot \frac{L}{2}$$

$$= 1 \qquad \therefore \ \psi \text{ est normalisée.}$$

(b)

$$P = \int_0^{0,22} \psi^2 dx = \frac{2}{L} \int_0^{0,22} \sin^2\left(\frac{1 \cdot \pi x}{L}\right) dx$$

$$= \frac{2}{L} \left[\frac{0,22}{2} - \frac{1}{4\left(\frac{n\pi}{L}\right)} \sin\left(\frac{2\pi \cdot 0,22}{L}\right) \right]$$

$$= \frac{0.22}{1} - \frac{1}{2\pi} \sin\left(2\pi (0.22)\right)$$

$$= 0,0437$$

∴ La probabilité est ~4%.

6. (4 points) Quelles sont les dégénérescences des quatre premiers niveaux d'énergie d'une particule dans un *cube* à trois dimensions? Montrez votre raisonnement pour obtenir tous les points.

$$E = (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2)\left(\frac{h^2}{8mL^2}\right)$$

état fondamentale: $n_1 = n_2 = n_3 = 1$

1e état excité: combinaisons de 1, 1, 2

n_1	1	1	2
n_2	1	2	1
n_3	2	1	1

} 3 possibilités

2e état excité: combinaisons de 1, 2, 2

n_1	1	2	2
n_2	2	2	1
n_3	2	1	2

} 3 possibilités

3e état excité: 2, 2, 2 ou 3, 1, 1 ?

n_1	3	1	1
n_2	1	3	1
n_3	1	1	3

} 3 possibilités

dégénérescence de l'état de plus basse énergie :	1
dégénérescence du premier état excité :	3
dégénérescence du deuxième état excité :	3
dégénérescence du troisième état excité :	3

Bonus (1 point):

La radiation électromagnétique avec une fréquence de 10^{13} Hz se trouve dans quelle région du spectre électromagnétique?

infrarouge