Nom ______________________________

Numéro d'étudiant ______________________

CHM 2711

Examen mi-session # 1

Date: 8 févr., 2018

Durée: 80 minutes

<u>Noter</u>

1. Faire attention aux choix disponibles.
2. L'examen est à livre fermé.
3. Seulement les calculatrices non-programmables sont autorisées.
4. La valeur de chaque question apparaît dans la marge

<u>Attention</u>

Les téléphones cellulaires, les appareils électroniques non autorisés ou les notes de cours (à moins qu'il s'agisse d'un examen à livre ouvert) ne sont pas autorisés pendant cet examen. Les téléphones et les appareils doivent être éteints et rangés dans votre sac. Ne les gardez pas en votre possession, par exemple dans vos poches. Si vous êtes pris avec un tel appareil ou document, des allégations de fraude scolaire seront déposées, ce qui pourrait entrainer l'obtention d'un 0 (zéro) pour l'examen.

En apposant votre signature ci-dessous, vous reconnaissez avoir lu et que vous assurez de respecter l'énoncé ci-dessus.

Signature:______________________________

8 févr, 2018 | CHM 2711 | NOM ______________
80 min. | EXAMEN MI-SESSION | #étud. ______________

1) Considérer les électrons π de la molécule linéaire C_4H_6 ($l = 5.6$ Å) comme étant des particules attrapées dans une boîte à 1-dimension

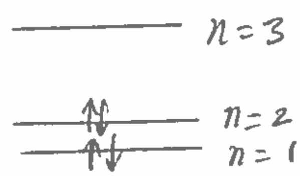
a) Combien d'électrons y'a-t-il dans le système π ?

2

4

b) Dessiner un diagramme d'énergie montrant les premiers 3 niveaux d'énergie π et le nombre d'électrons π qui occupent chaque niveau.

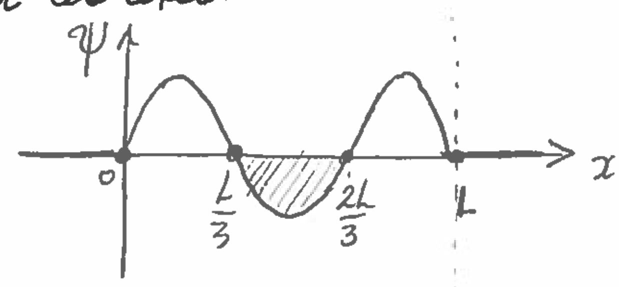
4



$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8mL^2} \propto n^2$$

c) Dessiner la fonction d'onde pour le niveau $n = 3$. Etiquetter les axes.

4



$$\psi = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{3\pi x}{L}\right)$$

d) Écrire une expression pour la probabilité qu'un électron excité dans le niveau $n = 3$ se trouve exactement entre les deux carbones centrals. Ne pas évaluer l'intégrale.

4

$$\text{Probabilité} = \int_{x=\frac{L}{3}}^{x=\frac{2L}{3}} \frac{2}{L} \sin^2\left(\frac{3\pi x}{L}\right) dx$$

Sans avoir besoin d'intégrer, on doit reconnaître que l'intégral est l'aire au dessous de ψ^2. L'aire dans l'intervale $\frac{L}{3} \leq x \leq \frac{2}{3}L$ est 1/3 de l'aire totale

e) Écrire une expression pour l'énergie requise afin d'exciter le C_4H_6 à partir de son état HOMO jusqu'à l'état LUMO.

$n=2$ $n=3$

4

$$E_3 = 9h^2/8mL^2$$
$$E_2 = 4h^2/8mL^2$$
$$\Delta E = E_3 - E_2 = 5h^2/8mL^2$$

f) Est-ce que le processus d'ionisation est possible selon ce modèle? Expliquer

2 Non car l'électron est attrapé dans la boîte

(2) Dans une expérience, on excite le seul électron de l'ion He^+ vers le niveau 2s. La fonction d'onde pour l'orbitale 2s est donnée par :

$$\Psi_{2s} = \frac{1}{2\sqrt{2}}\sqrt{\frac{1}{4\pi}}\left(\frac{2}{a_0}\right)^{3/2}(2-\rho/2)\,e^{-\rho/4}$$

où $\rho = 2r/a_0$

et a_0 est le rayon de Bohr.

Écrire une expression pour la probabilité de trouver l'électron dans cette orbitale entre les bornes :

$r = 0$ à $r = 2a_0$

$\theta = 0$ à $\theta = 90°$

$\phi = 0$ à $\phi = 2\pi$

Simplifier autant que possible. Vous devez être capable d'intégrer par rapport à θ et ϕ, mais ne pas essayer d'intégrer par rapport à r. Répondre sur la page suivante.

$$\text{Probabilité} = \int_{r=0}^{2a_0}\int_{\theta=0}^{90^\circ}\int_{\phi=0}^{2\pi} \psi^2 d\tau \quad ① \quad \text{où} \quad d\tau = r^2 dr \sin\theta d\theta d\phi \quad ①$$

$$= \int_{r=0}^{2a_0} \frac{1}{\cancel{8}}\cdot\frac{1}{4\pi}\cdot\left(\frac{\cancel{2}}{a_0}\right)^3 (2-\rho/2)^2 e^{-\rho/2} r^2 dr \quad ② \int_{\theta=0}^{90^\circ}\sin\theta d\theta \int_{\phi=0}^{2\pi} d\phi$$

$[\rho/2 = r/a_0]$

$$= \frac{1}{4\pi a_0^3}\int_{r=0}^{2a_0}\left(2-\frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-r/a_0} r^2 dr \underbrace{\int_{\theta=0}^{90^\circ}\sin\theta d\theta}_{①} \underbrace{\int_{\phi=0}^{2\pi} d\phi}$$

$$\phi\Big|_0^{2\pi} = 2\pi \quad ①$$

$\boxed{6}$

$$-\cos\theta\Big|_0^{90}$$

$$= -\cos 90^\circ + \cos 0$$

$$= 0 + 1$$

$$= 1$$

$$\text{Probabilité} = \frac{2\pi}{4\pi a_0^3}\cdot 1 \cdot \int_{r=0}^{2a_0}\left(2-\frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-r/a_0} r^2 dr$$

$$= \frac{1}{2a_0^3}\int_{r=0}^{2a_0}\left(2-\frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-r/a_0} r^2 dr$$

(3) a) Quelles sont les noms des règles qui prédisent que la Configuration électronique de l'atome de Si est

[Ne] | ↑↓ | ↑ | ↑ | | et ~~non~~ [Ne] | ↑↑ | ↑ | ↑ | | ou [Ne] | ↑↓ | ↑ | ↓ | |

3s $3p_x$ $3p_y$ $3p_z$

$\boxed{2}$ Nom Pauli Nom Hund

b) Quelle est la valeur de la différence d'énergie entre l'état attendu [Ne] | ↑↓ | ↑ | ↑ | | et [Ne] | ↑ | ↑ | ↑ | ↑ |, (l'état excité)

3s $3p_x$ $3p_y$ 3s $3p_x$ $3p_y$ $3p_z$

incluant des multiples de "l'énergie d'échange"

(Les énergies orbitalaires 3s et 3p sont de -15.0 et -7.8 eV)

$$\Delta E = (E_{3p_z} + \text{énergie d'échange}) - (E_{3s} + \text{énergie d'échange})$$

$\boxed{4}$

$$= [-7.8\,eV + (-6 \times 2K)] - [-15.0 + (-3 \times 2K)]$$

$$= 15\,eV - 7.8\,eV - 12K + 6K$$

$$= 7.2\,eV - 6K$$

(4.) La configuration électronique de l'atome de Cu est.

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1 3d^{10}$. Utiliser les règles de Slater afin de

a) calculer la charge effective sentie par un électron 4s et un électron 3d.

$$(1s^2)(2s^2 2p^6)(3s^2 3p^6)(3d^{10})(4s^1)$$

Z = 29 (même que le nombre d'électrons)

$\boxed{4}$

$\sigma = 18 \times 1.0 + 9 \times 0.35 = 21.15$ $\sigma = 18 \times 0.85 + 10 \times 1.0 = 25.30$

$Z_* = 29 - 21.15 = 7.85$ $Z_* = 29 - 25.3 = 3.7$

b) Calculer le "rayon" de l'ion Cu^+ en unités du rayon de Bohr.

Cu^+ : $(1s^2)(2s^2 2p^6)(3s^2 3p^6)(3d^8)(4s^2)$

$Z = 29$ (le même nombre de protons que dans le Cu.)

$\sigma = 18 \times 1.0 + 7 \times 0.35 = 18.0 + 2.45 = 20.45$

$Z_* = 29 - 20.45 = 8.55$

$\boxed{6}$ $r_* = \frac{n^2 a_0}{Z_*} = \frac{9}{8.55} a_0$

$= 1.05\ a_0$

$\sigma = 1 \times 0.35 + 16 \times 0.85 + 10 \times 1.0 = 23.95$

$Z_* = 29 - 23.95 = 5.05$

$r_* = \frac{n^2 a_0}{Z_*} = \frac{4^2}{5.05} = 3.17\ a_0$

Rayon est la taille correspondant à la plus grande valeur de r_*

rayon = 3.17 a_0

La réponse ci-dessus vient de l'approche d'aufbau (qu'on a appris en classe) Mais, en réalité, le Cu^+ (étant un métal de transition) est exceptionnel. L'effet Jahn-Teller (que nous n'avons pas appris) s'applique lorsqu'on perd des électrons de Cu. C'est le 4s qui est perdu. Ainsi la configuration électronique de Cu^+ est : $(1s^2)(2s^2 2p^6)(3s^2 3p^6)(3d^{10})(4s)^0$.
Alors. $\sigma = 9 \times 0.35 + 18 \times 1.0 = 21.15$, comme dans le cas de Cu.

$Z_* = 29 - 21.15 = 7.85$

$r_* = \frac{n^2 a_0}{Z_*} = \frac{9\ a_0}{7.85} = 1.15\ a_0$

Données

$$E = \frac{n^2 h^2}{8 m l^2}$$

$$P = \int \psi^2 d\tau$$

$$d\tau = \begin{cases} dx \\ dx\,dy\,dz \\ r^2 dr \sin\theta\, d\theta\, d\phi \end{cases}$$

$$\int \sin\theta\, d\theta = -\cos\theta$$

$$Z^* = Z - \sigma$$

$$r_* = \frac{n^2 a_0}{Z^*}$$

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right)$$