

MQ2-TD

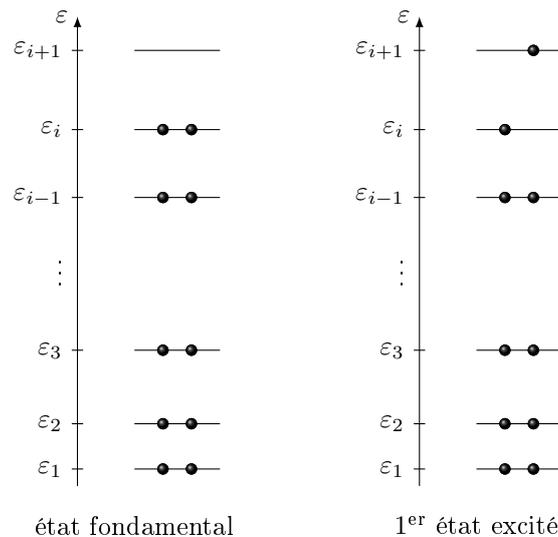
Correction

MQ2 – 02 Molécule linéaire conjuguée

1) C'est un puits infini. D'après le cours, les niveaux possibles sont (attention, k est ici un entier, pas le vecteur d'onde)

$$\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 \pi^2 k^2}{2 m L_n^2}$$

2) Il y a n électrons π , avec n pair. On écrit pour simplifier les notations $n = 2i$, avec i entier. Alors graphiquement, en rangeant les électrons suivant la règle de Pauli, le niveau fondamental et le premier niveau excité sont (l'échelle verticale n'est pas respectée)



Puisque les électrons sont indépendants, l'énergie de l'état fondamental est simplement la somme des énergies des électrons dans cet état, soit

$$E_0 = \sum_{k=1}^i 2\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 \pi^2}{m L_n^2} \sum_{k=1}^i k^2 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{6 m L_n^2} i(i+1)(2i+1) = \frac{\hbar^2 \pi^2}{24 m L_n^2} n(n+1)(n+2)$$

où le facteur 2 provient du fait qu'il y a deux électrons par niveau d'énergie k . Puis l'énergie du premier état excité est

$$E_1 = E_0 - \varepsilon_i + \varepsilon_{i+1}$$

puisque un électron est passé du niveau i au niveau $i+1$. On calcule

$$E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{24 m L_n^2} n(n+1)(n+2) + \frac{\hbar^2 \pi^2 (i+1)^2}{2 m L_n^2} - \frac{\hbar^2 \pi^2 i^2}{2 m L_n^2} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{m L_n^2} \left(\frac{n(n+1)(n+2)}{24} + \frac{n+1}{2} \right)$$

3) Si l'ion coloré passe du premier niveau excité à l'état fondamental, son énergie passe de E_1 à E_0 . Par conservation de l'énergie, il émet alors un photon d'énergie

$$E_{\text{ph}} = E_1 - E_0 = \frac{\hbar^2 \pi^2 (n+1)}{2 m L_n^2}$$

or la longueur d'onde d'un photon est reliée à son énergie par

$$\lambda = \frac{hc}{E_{\text{ph}}} \quad \text{soit} \quad \lambda = \frac{8 m c L_n^2}{h(n+1)} \quad \text{et finalement} \quad \boxed{\lambda = \frac{8 m c d^2 n^2}{h(n+1)}}$$

4) L'application numérique donne respectivement

$$\lambda_9 = 523 \text{ nm}, \quad \lambda_{11} = 652 \text{ nm}, \quad \lambda_{13} = 780 \text{ nm}, \quad \lambda_{15} = 909 \text{ nm} \quad \text{et} \quad \lambda_7 = 396 \text{ nm}.$$

Les couleurs correspondent effectivement à du bleu, du orange et du rouge. Les ions $n \leq 7$ et $n \geq 15$ ont des longueurs d'onde d'émission qui sortent du domaine visible [400 nm, 800 nm] et sont donc incolores. Remarquons cependant qu'ils peuvent être colorés du fait d'émission entre des niveaux plus excités.