Partiel Chimie Méd

(mercredi 12 décembre 2007)

Exercice 1 1) Soit $\mathbb{R}^3$ rapporté à sa base canonique $\kappa = (i, j, k)$, et soit des nombres a_2, a_3, b_1, c_2 et les vecteurs $a = a_2 j + a_3 k$, $b = b_1 i$, $c = c_2 j$. Montrer que $\beta = (a, b, c)$ est une base si et seulement si $a_3 \neq 0$.

2) Les angles formés par les vecteurs a et b, a et c, b et c valent respectivement 90°, 120° et 90°. Connaissant les normes des vecteurs a, b et c, à savoir respectivement 1, $0,5$ et 1, déterminer les valeurs de a_2 et a_3.

3) Calculer le volume du repère $(0; \beta)$

4) Déterminer la matrice de passage de κ à β. La position d'un atome dans le repère κ étant donnée par ses coordonnées (x, y, z), déterminer les coordonnées (X, Y, Z) du même atome dans la base β.

5) Expliciter également la matrice de passage de la base β à la base κ.

6) Application : Donner les coordonnées dans κ de l'atome situé en $(0,5,\ 0,5,\ 0,5)$ dans la base β, et les coordonnées dans β de l'atome situé en $(0,5,\ 0,5,\ 0,5)$ dans la base κ.

Exercice 2 Soit $S = \begin{pmatrix} 2 & 0 & -1 \\ 3 & 4 & -1 \\ 0 & 5 & 0 \end{pmatrix}$, $X = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$, $B = \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}$, et l'équation $SX = B$.

1) — Résoudre $SX = B$ par la méthode du pivot.

2) — Résoudre $SX = B$ par les formules de Cramer.

Exercice 3 Soit dans $\mathbb{R}^3$ rapporté à sa base canonique $\kappa = (i, j, k)$ le vecteur $n = \begin{pmatrix} \frac{2}{3} \\ -\frac{2}{3} \\ \frac{1}{3} \end{pmatrix}$.

1) Donner la matrice A relativement au départ et à l'arrivée à la base κ, de la rotation d'axe k et d'angle $\frac{\pi}{4}$, et celle B de la rotation d'axe k et d'angle $-\frac{\pi}{4}$.

2) Donner la matrice C relativement au départ et à l'arrivée à la base κ, de la rotation d'axe n et d'angle $\theta = \frac{\pi}{4}$, et celle D de la rotation d'axe k et d'angle $-\frac{\pi}{4}$.

3) Montrer que C et D sont inverses l'une de l'autre, et que chacune est orthogonale directe.

Exercice 4 Dans le cas du cyclobutadiène C_4H_4, calculer l'énergie E des électrons qui sont délocalisés sur l'ensemble de la molécule (électrons du système π) revient à déterminer les valeurs propres de la matrice $H = \begin{pmatrix} a & b & 0 & b \\ b & a & b & 0 \\ 0 & b & a & b \\ b & 0 & b & a \end{pmatrix}$, où a et b sont deux coefficients réels.

1) Trouver le polynôme caractéristique et les valeurs propres de H (il y a deux racines simples et une racine double).

2) Sachant que $a > 0$ et $b < 0$, classer les 4 énergies trouvées par ordre croissant. Dans cet ordre on les notera $E_1 \leq E_2 \leq E_3 \leq E_4$.

3) Trouver le vecteur propre e_1 associé à E_1.

4) Soient e_2, e_3 et e_4 les vecteurs propres associés à E_2, E_3 et E_4.. Donner l'expression de H_D, la matrice de H dans la base des vecteurs propres e_1, e_2, e_3, e_4.