Jeudi 28 mai 2009

INTERROGATION ÉCRITE DE CHIMIE, CORRIGÉ

L'usage des calculatrices n'est pas autorisé

1) Le moment cinétique orbital de l'électron d'un atome d'hydrogène est noté $\vec{L}$.

a) Deux composantes du vecteur $\vec{L}$, par exemple L_x et L_y, ne peuvent pas être simultanément déterminées ; on appelle ces deux grandeurs des grandeurs incompatibles (ou complémentaires)

b) Donner un autre exemple de grandeurs de ce type en physique quantique : position x et quantité de mouvement p_x

c) Quelle propriété du vecteur $\vec{L}$ est quantifiée par le nombre quantique azimutal ℓ ? Par quelle relation ?

ℓ quantifie la norme du moment cinétique par la relation $L = \sqrt{\ell(\ell+1)} \cdot \hbar$

d) Quelle propriété du vecteur $\vec{L}$ est quantifiée par le nombre quantique magnétique m_ℓ ? Par quelle relation ?

m_ℓ quantifie l'une des composantes du vecteur $\vec{L}$, par la relation $L_z = m_\ell \cdot \hbar$

e) Rappeler les valeurs que peut prendre ℓ dans un état de nombre quantique n donné.

$\ell \in \mathbb{N}$ avec $0 \leq \ell \leq n-1$

L'orbitale atomique $1s$ de l'atome d'hydrogène a pour expression :

$$\Psi_{1s} = N \times \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right)$$

où N est une constante réelle.

2) a_0 est une constante appelée rayon de l'atome de Bohr. Donner l'ordre de grandeur de a_0 : $a_0 \approx 0{,}05$ nm

3) Donner l'expression de la densité volumique de probabilité de présence $\rho_{1s} = f(r)$ déduite de l'expression de Ψ_{1s} : $\rho_{1s} = \overline{\Psi}_{1s} \cdot \Psi_{1s} = \Psi_{1s}^2 = N^2 \exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right)$

4) Expliquer comment déterminer la valeur de la constante N (on demande de poser le calcul en expliquant brièvement ce qu'il signifie, mais on ne demande pas d'effectuer les intégrations).

On exprime que la fonction Ψ_{1s} est normalisée, c'est-à-dire que la probabilité de trouver l'électron dans l'espace entier est égale à 1 :

$$P_{\text{espace}} = \int \mathrm{d}P = \int \rho_{1s} \mathrm{d}V = \iiint N^2 \exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right) \cdot r^2 \sin\theta \cdot \mathrm{d}r \cdot \mathrm{d}\theta \cdot \mathrm{d}\phi = 1$$

Les variables sont séparables, on peut donc écrire :

$$N^2 \times \left(\int_0^{+\infty} \exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right) \cdot r^2 \cdot \mathrm{d}r\right) \times \left(\int_0^{\pi} \sin\theta \cdot \mathrm{d}\theta\right) \times \left(\int_0^{2\pi} \mathrm{d}\phi\right) = 1$$

Après intégrations, on en déduit N.

5) Le rayon de l'orbitale $1s$ est de a_0. Rappeler la définition en physique quantique du rayon d'une orbitale atomique.

Le rayon d'une OA est le rayon du maximum de la fonction de distribution radiale (rayon le plus probable pour l'électron).