Jeudi 26 mai 2011

INTERROGATION ÉCRITE DE CHIMIE, CORRIGÉ

L'usage des calculatrices n'est pas autorisé

A) Généralités

1) Donner le nom du physicien français, prix Nobel de physique en 1929, considéré comme l'un des pères fondateurs de la physique quantique : Louis de Broglie

2) Donner l'unité et un ordre de grandeur de la constante de Planck : $h \approx 6{,}6 \cdot 10^{-34}$ J·s

Qu'appelle-t-on constante de Planck réduite ? $\hbar = \frac{h}{2\pi}$

3) En physique quantique, une particule est décrite par une fonction d'onde. Quelle signification physique peut-on donner à cette fonction, selon l'interprétation de Born ?

La fonction d'onde permet de calculer la densité de probabilité de présence par : $\rho = \overline{\Psi}\Psi$

4) Quel physicien a laissé son nom a l'équation fondamentale de la physique quantique permettant de calculer les fonctions d'onde, et que l'on résume parfois par $\widehat{\mathcal{H}}\Psi = E\Psi$? Erwin Schrödinger

B) On considère maintenant l'électron de l'atome d'hydrogène.

5) Qu'appelle-t-on orbitale atomique de l'atome d'hydrogène ?

Chacune des fonctions d'onde solutions de l'équation de Schrödinger pour l'atome d'hydrogène.

6) Donner la norme et le(s) composante(s) que l'on peut mesurer pour le vecteur moment cinétique, pour l'électron **d'une orbitale *d***.

Une orbitale d correspond à $\ell = 2$, donc $L = \sqrt{\ell(\ell+1)} \cdot \hbar = \sqrt{6} \cdot \hbar$

On ne peut connaître que l'une des composantes du moment cinétique, quantifiée par le nombre quantique m_ℓ par $L_z = m_\ell \cdot \hbar$.
Pour $\ell = 2$, m_ℓ peut prendre les valeurs $-2, -1, 0, +1$ ou $+2$, on peut donc mesurer 5 valeurs différentes pour L_z : $-2\hbar$; $-\hbar$; 0 ; $+\hbar$ ou $+2\hbar$.

7) La fonction de distribution radiale d'une orbitale atomique est définie par : $D = \frac{\mathrm{d}P_r}{\mathrm{d}r}$.
Que représente $\mathrm{d}P_r$ dans cette expression ?

$\mathrm{d}P_r$ est la probabilité élémentaire de trouver l'électron dans une coquille sphérique de rayon r et d'épaisseur $\mathrm{d}r$.

8) En une phrase, que signifie le fait qu'une orbitale atomique est normalisée ?

La probabilité de trouver l'électron dans l'espace entier est égale à 1.

Calculer le coefficient de normalisation N (réel positif) de l'orbitale $1s$, d'expression $\Psi_{1s} = N \times \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right)$, où a_0 est la constante de Bohr

On pourra utiliser le résultat suivant pour K une constante réelle quelconque :

$$\int_0^{+\infty} x^2 \exp(-Kx)\, \mathrm{d}x = 2/K^3$$

On exprime la probabilité dans l'espace par :

$$P_{espace} = \int_{r=0}^{+\infty} \int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\phi=0}^{2\pi} \rho \cdot r^2 \sin\theta \cdot \mathrm{d}r \cdot \mathrm{d}\theta \cdot \mathrm{d}\phi$$

Cette probabilité est égale à 1 (condition de normalisation) et $\rho = \overline{\Psi}\Psi = \Psi^2$ (interprétation de Born), donc :

$$P_{espace} = \int_{r=0}^{+\infty} \int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\phi=0}^{2\pi} N^2 \exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right) \cdot r^2 \sin\theta \cdot \mathrm{d}r \cdot \mathrm{d}\theta \cdot \mathrm{d}\phi$$

Cette intégrale est à variables séparables, donc on peut écrire :

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

On calcule chaque intégrale séparément (pour l'intégrale en r, on utilise l'indication mathématique fournie) :

$$\int_0^{+\infty} r^2 \exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right) \mathrm{d}r = \frac{2}{\left(\frac{2}{a_0}\right)^3} = \frac{a_0^3}{4}$$

$$\int_0^{\pi} \sin\theta \, \mathrm{d}\theta = [-\cos\theta]_0^{\pi} = -(-1) - (-1) = 2$$

$$\int_0^{2\pi} \mathrm{d}\phi = 2\pi$$

Finalement :

$$P_{espace} = N^2 \times \frac{a_0^3}{4} \times 2 \times 2\pi = 1$$

On trouve donc (N réel positif) :

$$\boxed{N = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}}$$