Université Cadi Ayyad
Faculté des Sciences
Semlalia - Marrakech

Département de Chimie
Année 2020 -2021
Semestre S1

Filière SMPC
Atomistique

Exercice 7 :

1- Calculer la longueur d'onde de De Broglie
a) d'une masse de 1,0 g se déplaçant à 1,0 $cm.s^{-1}$, puis à 100 $km.s^{-1}$
b) d'un atome He circulant à 1000 ms^{-1}.
3. Conclure.

Données : h = $6,626.10^{-34}$ J.s, 1eV= $1,6.10^{-19}$ J

Solution :

De Broglie, dans le cadre du modèle quantique, a rassemblé dans sa formule λ qui représente l'onde et mv qui représente la quantité de mouvement de la particule en mouvement d'où la dualité onde-corpuscule.

a- pour la masse de 1g, m=10^{-3} kg, v = 10^{-2} m/s,

$$\lambda = \frac{h}{mv} = \frac{6,626.10^{-34}}{10^{-3}x10^{-2}} = 6,626.\ 10^{-29}\ \text{m}.$$

Et m=10^{-3} kg, v = 10^{5} m/s,

$$\lambda = \frac{h}{mv} = \frac{6,626.10^{-34}}{10^{-3}x10^{5}} = 6,626.\ 10^{-36}\ \text{m}.$$

Ces deux valeurs de la longueur d'onde ne sont pas mesurables car très inférieures au seuil de 10^{-14} m.

b- la masse d'un atome de He est 6,6647 × 10^{-27} kg, v= 1000 ms^{-1}, on a alors :

$$\lambda = \frac{h}{mv} = \frac{6,626.10^{-34}}{6,6647.10^{-27}x10^{3}} = 9,941.\ 10^{-11}\ \text{m}.$$ Valeur mesurable car supérieure à 10^{-14} m.

c- Conclusion

Le caractère ondulatoire est vérifié surtout pour les systèmes infiniment petits qui se déplacent à grande vitesse tel que l'électron. Le principe de De Broglie est applicable pour les particules microscopiques.

Exercice 8 :

1- Rappeler le principe d'incertitude de Heisenberg.
2- Supposons qu'on souhaite déterminer la position d'un électron avec une incertitude de 5. 10^{-11} m, qui représente une fraction du diamètre d'un petit atome. En se basant sur le principe d'incertitude de Heisenberg, estimer l'incertitude minimale qui correspondrait à la vitesse de cet électron. Quelle serait l'incertitude relative lorsque l'électron se déplace à la vitesse de 3,05. 10^{7} m/s ?
3- Soit une balle de golf, dont la masse est égale à 45,9 g et se déplaçant à 193 km/h. Si on conçoit une expérience qui permette de mesurer la position de la balle de golf à un moment donné avec une incertitude de 1 µm, quelle sera alors l'incertitude liée à la vitesse de cette balle? Quelle serait l'incertitude relative dans ce cas?
4- Conclure

Données : h = 6,626 10^{-34} J.s. m_e = 9,109 10^{-31} kg ; 1 eV = 1,6 10^{-19} J, c = 3.10^{8} m/s, 1 Å = 10^{-10} m.

Solution

1- Principe d'incertitude de Heisenberg.

Il est impossible de connaître simultanément et avec précision la position (x) et la quantité de mouvement (p) d'une particule en mouvement. Tout ce que l'on peut savoir c'est :

$\Delta p \Delta x \geq \frac{h}{2\pi}$ Lorsque l'on cherche à améliorer la précision de la position, on dégrade la mesure de la vitesse, et inversement. Autrement dit, dans le cas limite on a $\Delta p \Delta x = \frac{h}{2\pi}$ avec $\frac{h}{2\pi}$ est une constante, donc si on diminue la valeur de Δp, celle de Δx augmente et alors dans ce cas, nous connaissons la quantité de mouvement et donc la vitesse de l'électron avec précision mais nous n'avons aucune idée sur sa position ou la distance entre le noyau et cet électron.

2- L'incertitude sur la position de l'électron est $\Delta x = 5.10^{-11}$ m, la relation d'Heisenberg s'écrit

$\Delta p \Delta x \geq \frac{h}{2\pi}$ Avec p = mv, Δmv = mΔv + vΔm = mΔv car Δm=0.

Soit $m\Delta v\, \Delta x \geq \frac{h}{2\pi}$ donc $\Delta v \geq \frac{h}{2\pi m \Delta x}$, $\Delta v \geq \frac{6{,}626.10^{-34}}{2x3{,}14x9{,}109.10^{-31}x5.10^{-11}}$

$\Delta v \geq 2{,}31.10^{6}$ m/s, L'incertitude minimale est de $\Delta v = 2{,}31.10^{6}$ m/s. Cette incertitude est trop élevée.

Le principe d'Heizenberg se confirme, nous connaissons Δx avec précision et pas Δv.

3- La masse de la balle de golf a une masse $m=45{,}9.10^{-3}$ kg et $\Delta x = 1\ \mu m = 10^{-6}$ m

L'incertitude sur la vitesse est $\Delta v \geq \frac{h}{2\pi m \Delta x}$, $\Delta v \geq \frac{6{,}626.10^{-34}}{2x3{,}14x45{,}9.10^{-3}x10^{-6}}$

$\Delta v \geq 2{,}29.10^{-27}$ m/s, comme v = 193 km/h = 53,61 m/s.

L'incertitude relative est $\frac{\Delta v}{v} = \frac{2{,}29.10^{-27}}{53{,}61} = 4{,}27.10^{-29}$.

Aussi bien l'incertitude absolue que l'incertitude relative $\frac{\Delta v}{v}$ n'ont pas de sens physique car infiniment petites.

4- Le principe d'Heizenberg est une notion quantique inapplicable sur les objets macroscopiques tels qu'une balle de golf.

Exercice 9 :

La fonction d'onde de l'orbitale 1s de l'atome d'hydrogène a pour expression :

$$\Psi_{(1s)} = \sqrt{\frac{1}{\pi a_0^3}} e^{\frac{-r}{a_0}}$$

1- Ecrire La densité de probabilité radiale D(r) de l'électron autour de son noyau :

La particularité de Schrödinger, stipule qu'on ne pose plus la question '**où est l'électron ?**' mais on se place sur un point M et on détermine la probabilité de présence de l'électron en ce point.

2- Pour quelles valeurs du rayon r, cette densité de probabilité radiale est-elle maximale ?

3- Faire le même calcul pour la 2s de l'hydrogène dont la fonction d'onde s'écrit :

$$\Psi_{2s} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \frac{1}{\sqrt{8a_0^3}} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) . e^{-\frac{r}{2a_0}}$$

4- Comparer les deux rayons

Solution :

L'expression de la densité de probabilité radiale s'écrit :

1- $\frac{dp}{dr} = D(r) = \Psi^2 4\pi r^2 = \frac{4r^2}{a_0^3} e^{\frac{-2r}{a_0}}$

$\psi(r,t)$ appelée fonction d'onde n'a pas de sens physique, seul son carré permet de déterminer la probabilité de présence de la particule en un point M de l'espace ou dans un petit volume dv.

Soit $dp = \Psi^2 dv$

Comme l'orbitale atomique 1s est de symétrie sphérique, $v = \frac{4}{3}\pi r^3$

$dv = 3\frac{4}{3}\pi r^2 dr = 4\pi r^2 dr$ alors $dp = \Psi^2 dv = \Psi^2 4\pi r^2 dr$ soit $\frac{dp}{dr} = D(r) = \Psi^2 4\pi r^2$

est la densité de probabilité RADIALE notée D(r).

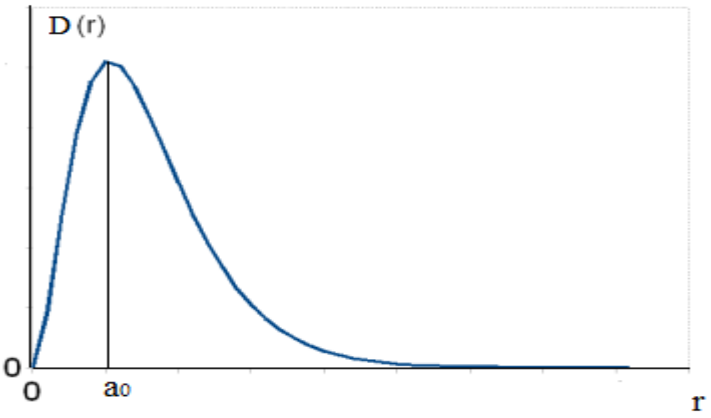
2- il nous suffit de réaliser l'étude de cette fonction. Cette fonction sera maximale lorsque sa dérivée s'annule :

$D'(r) = 0 = \frac{8r}{a_0^3} e^{\frac{-2r}{a_0}} + \frac{4r^2}{a_0^3} (-\frac{2}{a_0}) e^{\frac{-2r}{a_0}} = \frac{8r}{a_0^3} e^{\frac{-2r}{a_0}} (1 - \frac{r}{a_0}) = 0$

Si r = 0, $1 - \frac{r}{a_0} = 0$ ou $e^{\frac{-2r}{a_0}} \longrightarrow 0$

Soit r = 0, $r = a_0$, ou $r \longrightarrow +\infty$

Cette fonction va s'annuler pour r = 0 ou pour $r = a_0$. On peut aussi voir que cette dérivée de D'(r) est positive entre 0 et a_0, négative ensuite. D(r) est donc d'abord croissante jusque $r = a_0$, puis décroissante ensuite. La figure suivante montre l'évolution de D(r) en fonction de la distance r électron – noyau.



La densité radiale de probabilité de présence est maximale pour $r = a_0$ (rayon de Bohr) On dit que c'est le rayon le plus probable.

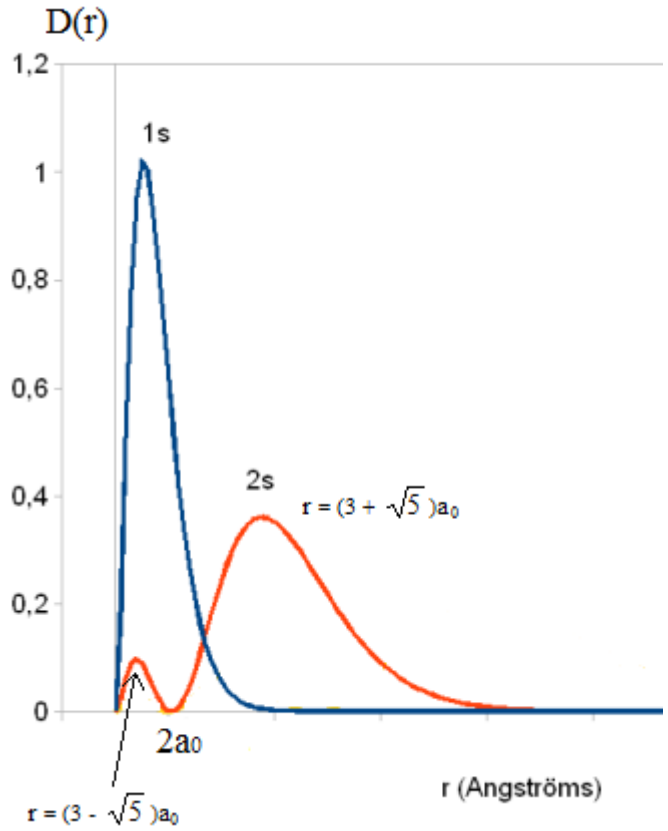
3-

$$\Psi_{2s} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \frac{1}{\sqrt{8a_0^3}} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}}$$

$$\frac{dp}{dr} = D(r) = \Psi^2 4\pi r^2 = \frac{r^2}{8a_0^3}(2 \quad \frac{r}{a_0})^2 e^{\frac{-r}{a_0}}$$

$D'(r) = r \quad (2-\frac{r}{a_0}) \quad (r2 - 6a_0r + 4\, a_0^2)\, e^{\frac{-r}{a_0}} = 0$

Si $r = 0$, $r = 2a_0$, ou $r = (3 \pm \sqrt{5})a_0$, $r \longrightarrow +\infty$



Remarque :
L'orbitale 2s présente un nœud de la région de l'espace où la probabilité de trouver l'électron est nulle (quand $r=2a_0$). C'est un espace nodal (espace où l'électron ne peut pas s'y trouver).

4- Les densités de probabilité sont maximales pour :

r_{max} (1s) $= a_0$, et r_{max} (2s) $= (3 + \sqrt{5})a_0$,

Le rayon d'une fonction propre (défini comme le maximum de densité de probabilité radiale) croit avec n. r_{max} (2s) $> r_{max}$ (1s)
Et donc le volume de l'orbitale atomique dépend de n. Plus n est grand, plus le rayon est grand, plus le volume de la fonction d'onde ou l'orbitale atomique est grand.