



**CH-110 Chimie
Générale Avancée I**

Prof. A. Steinauer
angela.steinauer@epfl.ch

Notes de gestion

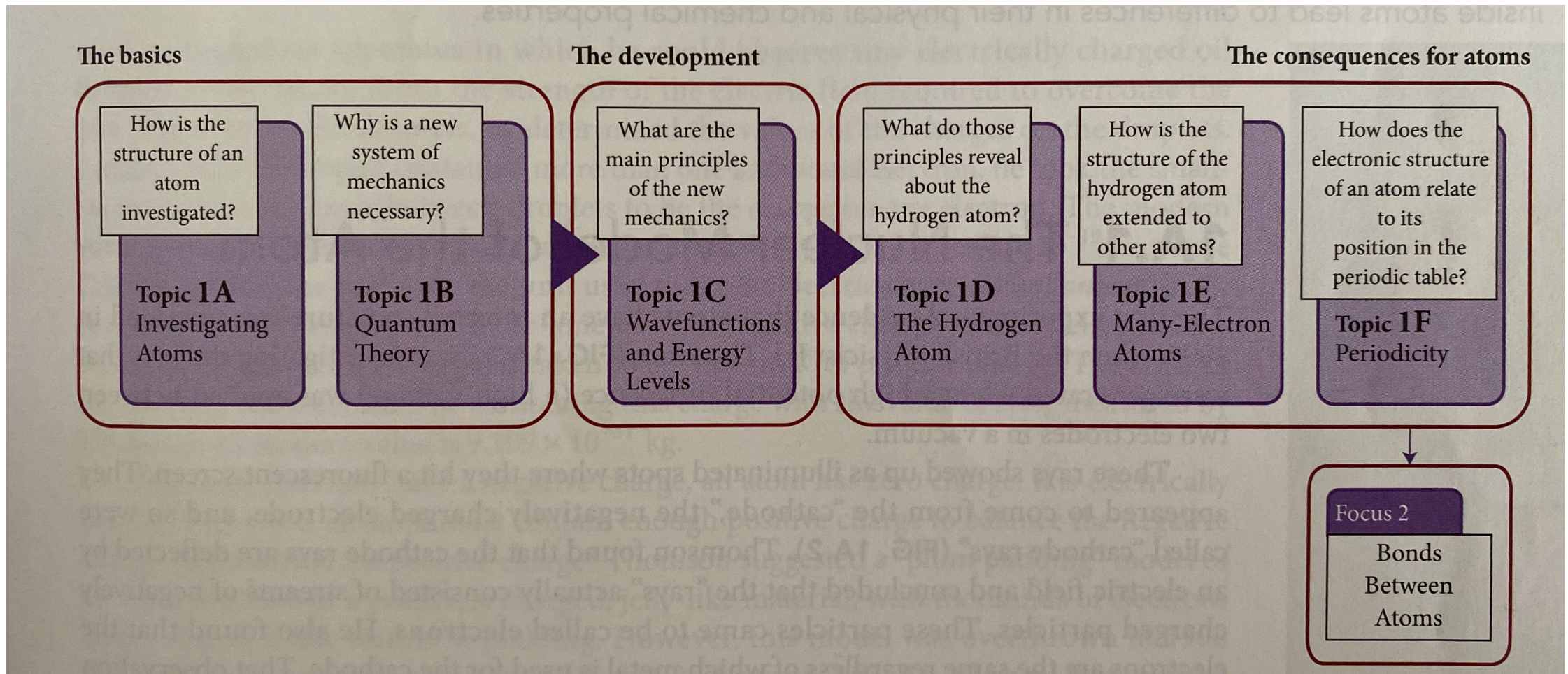
Calculatrice à l'examen: non programmable. Mode "examination" est OK.

Français: les sous-titres sur les enregistrements Mediaspace prennent environ une semaine à être générés par CeDE (semaine 1 a maintenant des sous-titres en français). Les assistants traduisent les diapositives au fur et à mesure.

Fonction d'onde et niveaux d'énergie

Sujet 1C

Aperçu Chapitre 1 (Sujet 1: Atomes)



Sujet 1C.1 La fonction d'onde et son interprétation

Sujet 1C.2 La quantification de l'énergie

POURQUOI AVEZ-VOUS BESOIN DE
CONNAÎTRE CE MATÉRIEL?

- Chaque fois que vous traitez de mécanique quantique, vous devez prendre en compte **les propriétés des fonctions d'onde et l'information qu'elles contiennent.**

QUE FAUT-IL DÉJÀ SAVOIR?

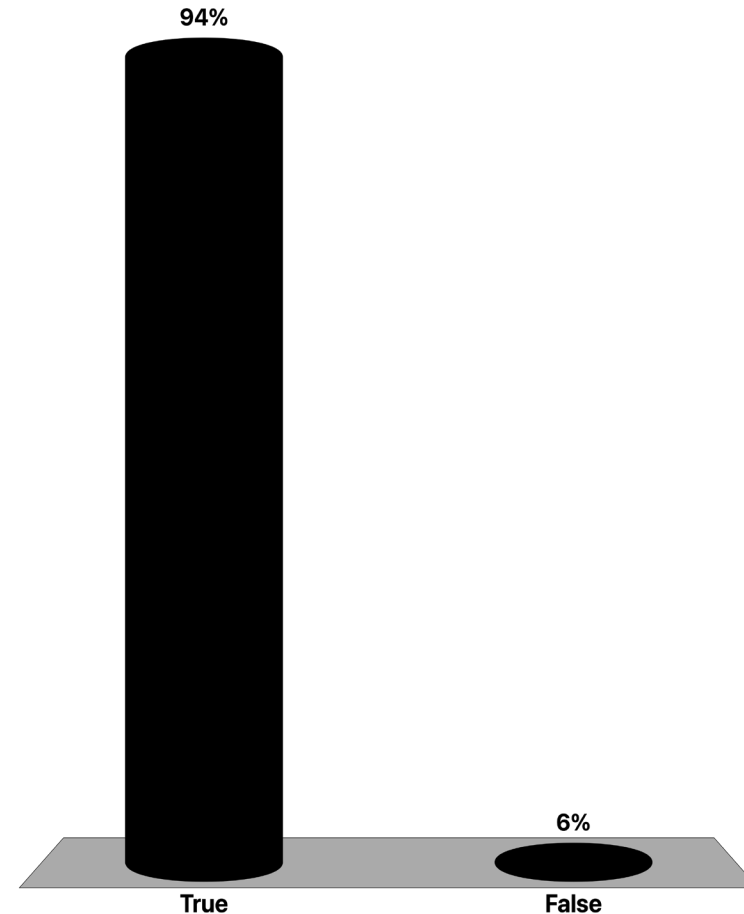
- Propriétés des fonctions sinus ($\sin x$)
- Concept de dualité
- Relation de De Broglie entre la quantité de mouvement et la longueur d'onde
- Principe d'incertitude de Heisenberg

Révision de mardi:

Vrai/Faux: Le concept de dualité onde-particule affirme que les particules, telles que les électrons, peuvent présenter à la fois des propriétés ondulatoires et des propriétés particulières.

- A. Vrai
- B. Faux

Session ID: 377285
responseware.eu



Révision de mardi:

Vrai/Faux: Seule la lumière présente la dualité onde-particule ; les particules de matière comme les électrons se comportent toujours comme des particules.

A. Vrai

B. Faux

Session ID: 377285

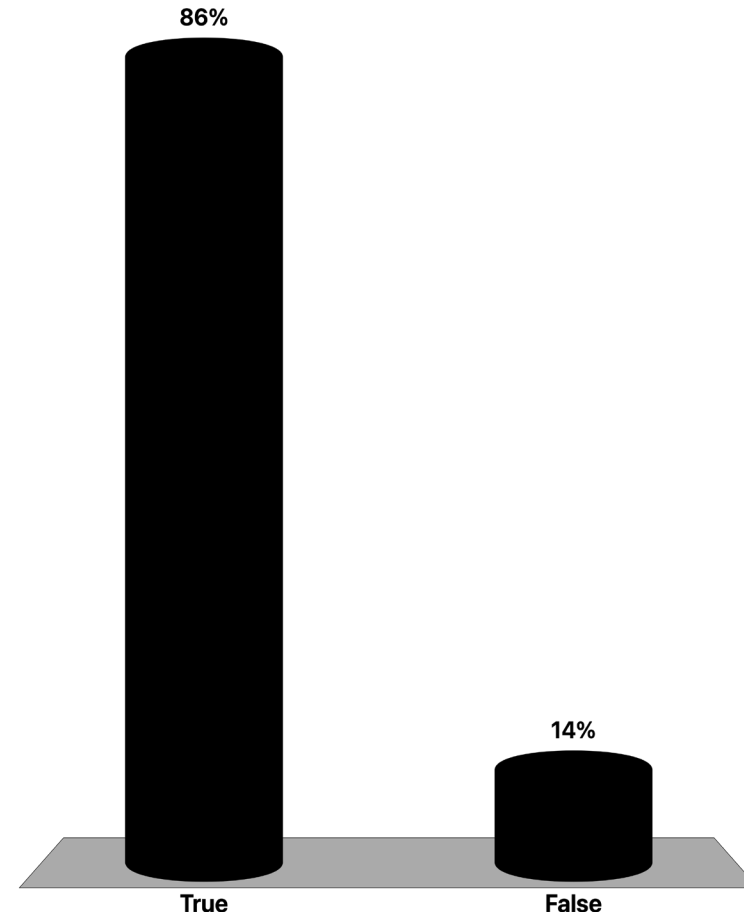
responseware.eu

Révision de mardi:

Vrai/Faux: L'effet photoélectrique, qui se traduit par l'émission d'électrons d'une surface lorsqu'elle est éclairée par une lumière d'une fréquence particulière, a apporté la preuve de la nature particulaire de la lumière.

- A. Vrai
- B. Faux

Session ID: 377285
responseware.eu



Révision de mardi:

Vrai/Faux: Selon la dualité onde-particule, un électron dans un atome est décrit par une orbite, un peu comme les planètes autour du soleil.

A. Vrai

B. Faux

Session ID: 377285

responseware.eu

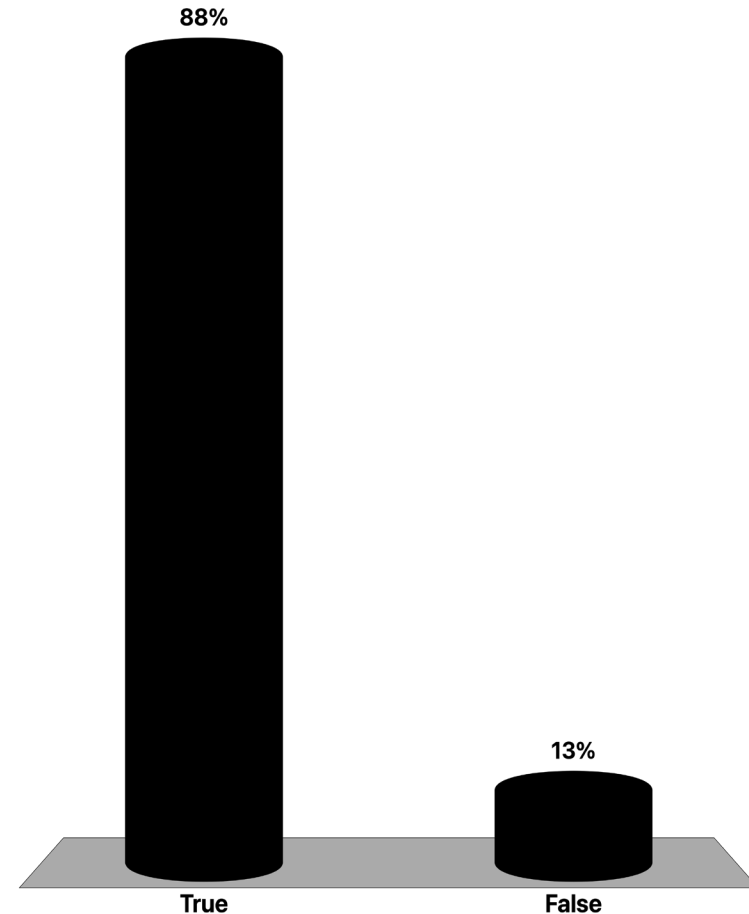
Révision de mardi:

Vrai/Faux: La longueur d'onde associée à une particule est inversement proportionnelle à sa quantité de mouvement linéaire, comme le montre l'équation de Broglie.

- A. Vrai
- B. Faux

Session ID: 377285

responseware.eu

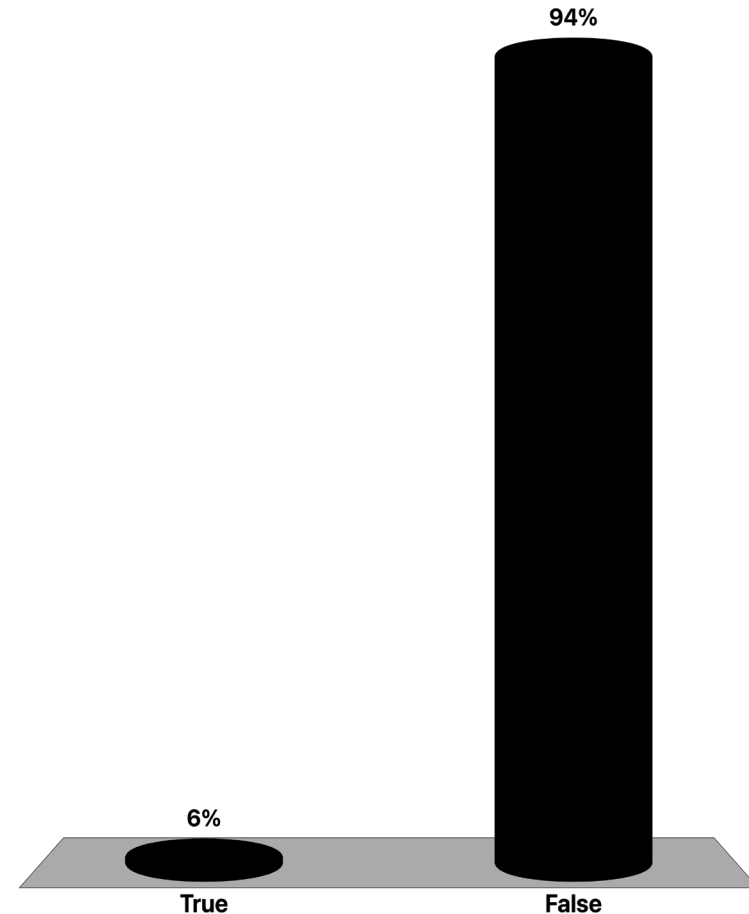


Révision de mardi:

Vrai/Faux: La nature ondulatoire des particules n'est observable qu'à l'échelle macroscopique de tous les jours et n'a aucune signification au niveau quantique.

- A. Vrai
- B. Faux

Session ID: 377285
responseware.eu



Solutions

Vrai: Le concept de dualité onde-particule affirme que les particules, telles que les électrons, peuvent présenter à la fois des propriétés ondulatoires et des propriétés particulières. Explication : Cette idée fondamentale de la mécanique quantique est née d'expériences montrant que certains phénomènes (par exemple, l'interférence et la diffraction) ne peuvent être expliqués que si les particules ont également des propriétés ondulatoires.

Faux: Seule la lumière présente la dualité onde-particule ; les particules de matière comme les électrons se comportent toujours comme des particules. Explication: La lumière (traditionnellement considérée comme une onde) et les particules de matière (comme les électrons) présentent toutes deux la dualité onde-particule. Cela a été démontré de manière célèbre par l'expérience de la double fente des électrons.

Vrai: L'effet photoélectrique, qui consiste à émettre des électrons à partir d'une surface lorsqu'elle est éclairée par une lumière d'une fréquence particulière, a prouvé la nature corpusculaire de la lumière. Explication : Albert Einstein a expliqué l'effet photoélectrique en proposant de considérer la lumière comme des paquets discrets ou des quanta d'énergie, appelés plus tard photons. Cette vision quantifiée de la lumière démontre sa nature de particule.

Faux: Selon la dualité onde-particule, un électron dans un atome est décrit par une orbite, un peu comme les planètes autour du soleil. Explication : En mécanique quantique, les électrons dans les atomes sont décrits par des fonctions d'onde, et non par des orbites classiques. Ces fonctions d'onde représentent la densité de probabilité de trouver un électron à un endroit donné.

Vrai: La longueur d'onde associée à une particule est inversement proportionnelle à sa quantité de mouvement, comme le montre l'équation de de Broglie. Explication : Louis de Broglie a proposé que les particules puissent avoir des longueurs d'onde données par $\lambda = h/p$, où h est la constante de Planck et p la quantité de mouvement linéaire.

Faux: La nature ondulatoire des particules n'est observable qu'à l'échelle quotidienne, macroscopique, et n'a aucune signification au niveau quantique. Explication : C'est le contraire. Les propriétés ondulatoires des particules sont surtout significatives et observables à l'échelle quantique (microscopique) et deviennent négligeables à l'échelle macroscopique en raison des très petites longueurs d'onde impliquées.

Résumé de mardi passé

- Nature particulière des rayonnements électromagnétiques
- L'échange d'énergie entre matière et lumière n'est pas continu, mais il a lieu sous la forme de paquets d'énergie identiques, appelés quanta → flux de photons
- Photon: particule sans masse qui voyage à la Vitesse de la lumière, c
- Analogie: jet d'eau (flux de molécules d'eau)

La fonction d'onde et son interprétation

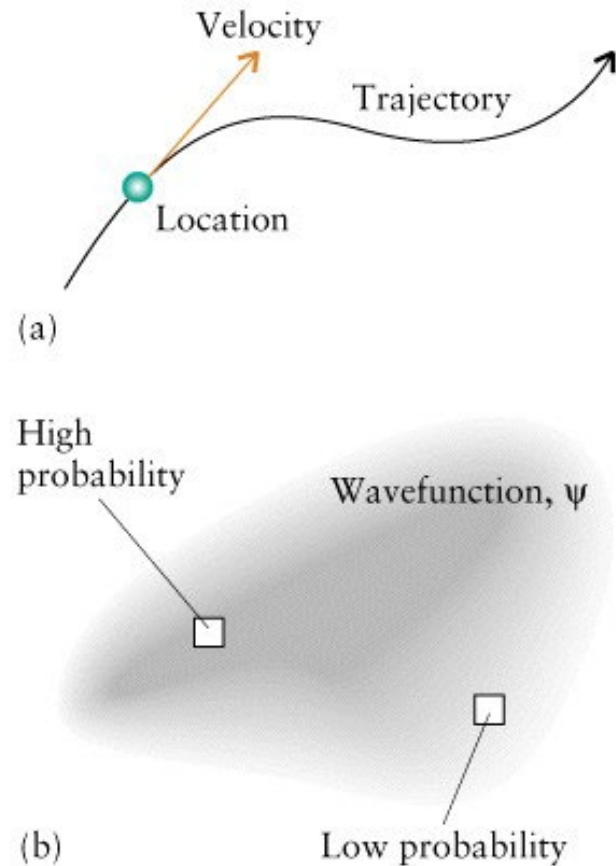
Sujet 1C.1

Les compétences que vous avez maîtrisées sont la capacité à

- ❑ **Décrire** l'origine et les formes des fonctions d'onde d'une particule dans une boîte. (AUJOURD'HUI)
- ❑ **Calculer** les énergies autorisées d'une particule dans une boîte et expliquer comment elles dépendent de la longueur de la boîte et de la masse de la particule. (Semaine prochaine)
- ❑ **Expliquer** ce que l'on veut dire par «énergie du point zéro» et expliquer son origine. (Semaine prochaine)

1C.1 La longueur d'onde et son interprétation

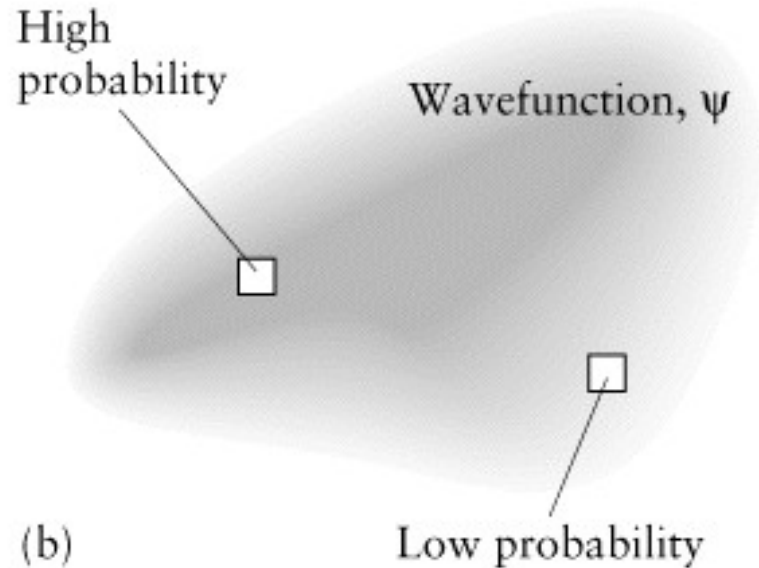
La fonction d'onde et la densité de probabilité



- **Mécanique classique:** la position et la vitesse d'une particule sont connues précisément à chaque instant (**trajectoire**), décrite par un **chemin ou une fonction de position $x(t)$** .
- **Mécanique quantique:** la particule est mieux décrite par sa nature ondulatoire avec une **fonction d'onde ψ** (position pas définie) et une **densité de probabilité ψ^2** .

1C.1 La longueur d'onde et son interprétation

La fonction d'onde et la densité de probabilité



$|\psi|^2$: Le **carré de la fonction d'onde** est une mesure de la **densité de probabilité** de trouver la particule à un point donné.

$P(\mathbf{r})$ est la probabilité de trouver la particule dans un élément volumique dV infiniment petit autour de r .

$$P(\mathbf{r}) = \psi^2(\mathbf{r})dV$$

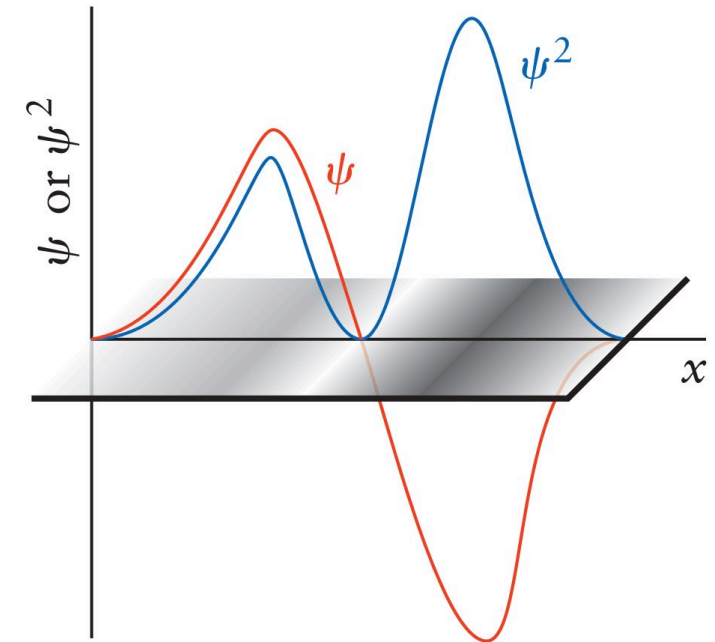
La **probabilité totale** de trouver la particule n'importe où dans l'espace **est égale à 1** (i.e. la particule doit forcément être situé quelque part dans ce volume).

$$\int \psi^2(\mathbf{r})dV = 1$$

1C.1 La longueur d'onde et son interprétation

ψ est une onde

- ψ = onde, peut être + ou - \rightarrow interférence.
- ψ^2 = densité de probabilité, toujours ≥ 0 .
- Grand $|\psi|$ \rightarrow haute probabilité de trouver la particule.
- $\psi = 0$ \rightarrow particule pas trouvée.
- Nœuds = points où ψ traverse 0 \rightarrow zéro probabilité.



1C.1 La longueur d'onde et son interprétation

Analogie: densité vs. densité de probabilité

- **Densité massique:** vous dit quelle masse se trouve dans chaque unité de volume.

Masse dans une région = densité × volume.

- **Densité de probabilité:** vous dit la probabilité de trouver la particule dans chaque unité de volume (toujours positive).

Probabilité dans une région = densité de probabilité × volume.

Point clé à retenir: Multiplier densité par volume → détermine masse totale (classique) ou probabilité totale (quantique).

1C.1 La longueur d'onde et son interprétation

Exemple: Analogie densité physique

Exemple numérique

- **Densité massique:** Un metal a une densité de 10 g/cm^3 .

Dans un volume de 2 cm^3 : $\text{Masse} = 10 \times 2$
 $= 20 \text{ g}$

- **Densité de probabilité:** Une particule a une densité de probabilité de 0.2 per cm^3 .

Dans une région de 2 cm^3 : $\text{Probabilité} = 0.2$
 $\times 2 = 0.4$

→ 40% probabilité de trouver la
particule dans ce volume.



Source de l'image: ChatGPT.
Un cube doré.

1C.1 La longueur d'onde et son interprétation

Probabilité vs. densité de probabilité

- Probabilité: **sans unité**, peut avoir des valeurs entre 0 (sûrement *pas* là) et 1 (sûrement là)
- Densité de probabilité: unités sont **1/volume**

1C.1 La longueur d'onde et son interprétation

Quel information sur la position peut-on obtenir à partir de la fonction d'onde?

- La **densité de probabilité** de trouver une particule à différentes positions (où est la plus grosse/petite probabilité).
- La **probabilité** de trouver la particule dans un volume donné.

Cependant, pour faire des prédictions, nous devons encore connaître la forme de la fonction d'onde, ψ .

Cette fonction n'est pas arbitraire: elle est déterminée **par l'équation de Schrödinger**, qui joue le même rôle en mécanique quantique que les lois de Newton ($F = ma$) jouent en mécanique classique.

1C.1 La longueur d'onde et son interprétation

L'équation de Schrödinger

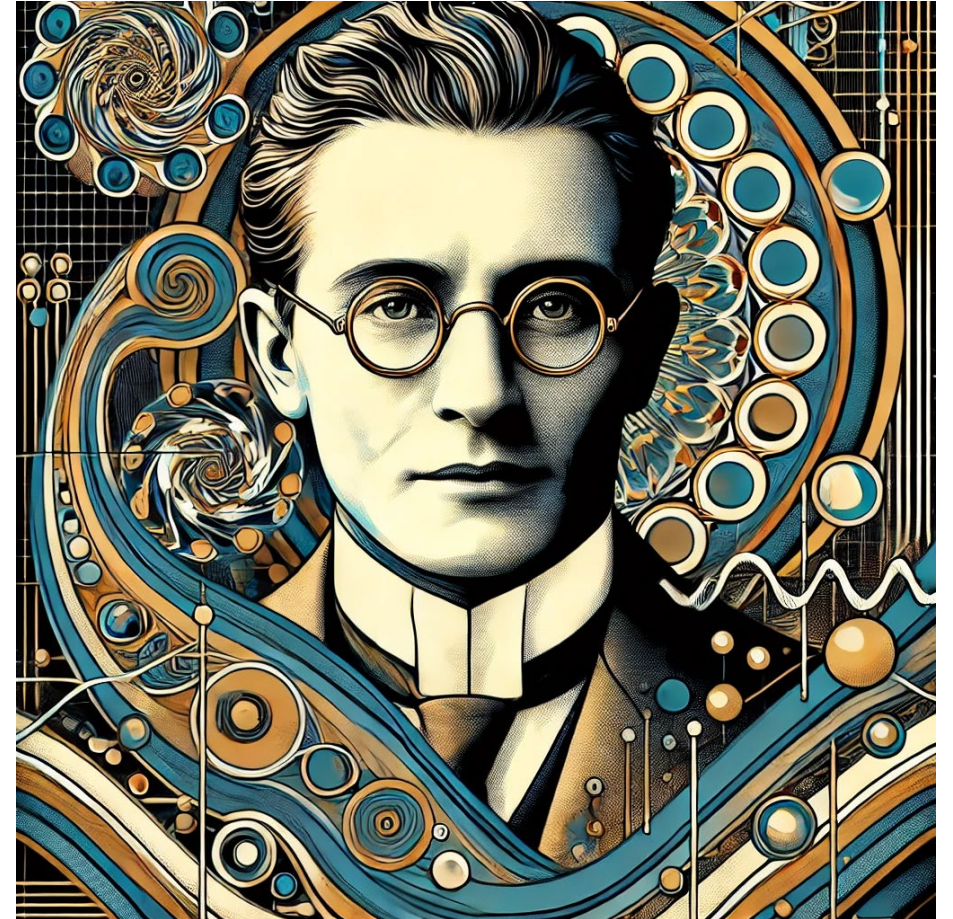
$$H\psi = E\psi$$

ψ = la fonction d'onde, nous dit où la particule est susceptible de se trouver.

E = l'énergie de la particule.

\hat{H} = l'"Hamiltonian," un opérateur qui représente l'énergie totale du système (cinétique + potentiel).

L'équation dit: *seules certaines fonctions d'onde ψ sont autorisées, et chacune correspond à une énergie spécifique E .*



Source de l'image: ChatGPT.
Erwin Schrödinger, avec ses lunettes rondes caractéristiques, sur un fond de fonction d'onde dans le style sécessionniste viennois.

1C.1 La longueur d'onde et son interprétation

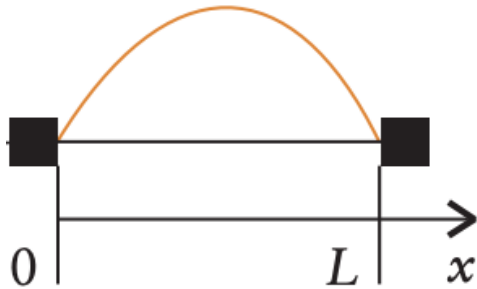
L'équation de Schrödinger

- L'équation de Schrödinger est utilisée pour calculer la **fonction d'onde (ψ)** et **l'énergie correspondante (E)** pour une particule confinée dans l'espace, tels des électrons dans des atomes ou des molécules.
- Dans ce cours, **nous n'allons pas résoudre l'équation directement**, mais vous devriez connaître la forme de certaines de ses solutions.
- L'équation de Schrödinger est une **équation différentielle**. Vous étudierez ce sujet plus en détail plus tard.

1C.1 La longueur d'onde et son interprétation

Le modèle de la particule dans une boîte

La fonction d'onde de la particule dans son niveau d'énergie le plus bas (état fondamental, $n = 1$):



$$\psi_1(x) = \left(\frac{2}{L}\right)^{\frac{1}{2}} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)$$

Et donc:

$$\psi_1^2(x) = \left(\left(\frac{2}{L}\right)^{\frac{1}{2}} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)\right)^2 = \frac{2}{L} \sin^2\left(\frac{\pi x}{L}\right)$$

Et $P(x=0) = P(x=L) = 0$

1C.1 La longueur d'onde et son interprétation

APERÇU: Le modèle de la particule dans une boîte

Quelle est la probabilité maximale? (Où est-ce que l'électron est plus susceptible de se trouver?)

$$\frac{d\psi^2(x)}{dx} = \frac{2}{L} \left(\frac{d}{dx} \right) \left[\sin^2 \left(\frac{\pi x}{L} \right) \right] = 0 \quad \Longrightarrow \quad \frac{4}{L} \sin \left(\frac{\pi x}{L} \right) \cos \left(\frac{\pi x}{L} \right) \left(\frac{\pi}{L} \right) = 0$$

$$\frac{4\pi}{L^2} \sin \left(\frac{\pi x}{L} \right) \cos \left(\frac{\pi x}{L} \right) = 0 \quad \Longrightarrow \quad \cos \left(\frac{\pi x}{L} \right) = 0 \quad \Longrightarrow \quad \left(\frac{\pi x}{L} \right) = \frac{\pi}{2}$$

$$\Longrightarrow \quad \psi_{max}^2(x) \text{ is at } x = L/2 \quad \text{La densité de probabilité est la plus élevée au milieu de la boîte.}$$

Note: dans le cas classique, la densité de probabilité est identique pour tout x! P(x) est constant.

1C.1 La longueur d'onde et son interprétation

Exercice 3 (Semaine prochaine)

- Vous aurez l'opportunité de vous familiariser davantage avec le modèle de la particule dans une boîte pendant la séance d'exercices du vendredi 26.9.25.
- Yannick résoudra le premier exercice sur le tableau.
- Cependant: À l'examen final, nous NE vous demanderons PAS de faire des dérivées ou des intégrales.