TD n°4

NB : Cet exercice sera complété au deuxième semestre par l'étude de la décongélation des aliments par micro-ondes.

<u>*Données*</u> *:* *Constante de gravitation :* $G = 6{,}7.10^{-11}$ *uSI*

Permittivité du vide : $\varepsilon_0 = 8{,}8.10^{-12}\ F.m^{-1}$

Charge élémentaire : $e = 1{,}6.10^{-19}\ C$

Masse d'un atome d'hydrogène : $m_H = 1{,}7.10^{-27}\ kg$

Masse d'un atome d'oxygène : $m_O = 2{,}7.10^{-26}\ kg$

Distance entre les centres des ions H^+ *et* O^{2-} *dans* H_2O *:* $L \cong 1{,}0.10^{-10}\ m$

A / APPROCHE ELECTROSTATIQUE DE LA MOLECULE D'EAU

Une charge ponctuelle q_1 *est fixée au point O.*

A1. Rappeler l'expression du potentiel électrostatique V(M) créé dans le vide par la charge ponctuelle q_1 en un point M situé à la distance r du point O *(le potentiel sera pris nul à l'infini).*

Une deuxième charge q_2 *est placée en un point N, à la distance L de O (<u>figure 1</u>).*

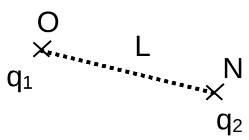

Figure 1

A2. En déduire l'énergie potentielle d'interaction électrostatique W_{12} entre les deux particules chargées q_1 et q_2.

Les deux particules chargées q_1 *et* q_2 *ont des masses respectives* m_1 *et* m_2*.*

A3. Par identification avec l'énergie potentielle d'interaction électrostatique, exprimer l'énergie potentielle d'interaction gravitationnelle $W_{grav,12}$ entre les deux particules chargées q_1 et q_2. Calculer le rapport $\eta = \left|W_{12} / W_{grav,12}\right|$ si la charge q_1 est un ion hydrogène H^+ et q_2 un ion oxygène O^{2-}. Qu'en déduire pour une étude énergétique de la molécule d'eau ?

La molécule d'eau peut approximativement être décrite de la manière suivante (<u>figure 2</u>) : un ion ponctuel O^{2-} *est à la distance L de deux ions ponctuels* H^+*, l'angle* $\measuredangle HOH$ *étant noté* 2θ*.*

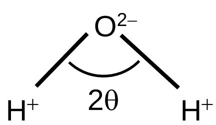

Figure 2

A4. Déterminer l'énergie d'interaction électrostatique W_{HH} entre les deux ions H^+, puis l'énergie d'interaction W_{OH} entre un ion H^+ et l'ion O^{2-}, en fonction notamment de la charge élémentaire e, de L et de l'angle θ.

L'énergie potentielle électrostatique W de la molécule d'eau s'exprime, en supposant comme précédemment les charges ponctuelles, sous la forme : $W = W_{HH} + 2\,W_{OH}$ *.*

A5. Expliquer les signes de W_{HH} et W_{OH}. Justifier la présence du facteur 2.

La fonction $W(L,\theta)$ *représente l'énergie potentielle de la molécule d'eau.*

Dans la suite, la longueur L sera supposée fixe. L'expression de l'énergie potentielle de la molécule d'eau W(θ) sera fonction uniquement de l'angle θ.

A6. Quelle est la valeur θ_0 de l'angle à l'équilibre, prévu par la modélisation précédente ? Cet équilibre est-il stable ? Comment expliquer simplement la valeur de θ_0 ?

A7. En faisant appel aux connaissances acquises dans le cours de chimie, expliquer quelle valeur est attendue pour θ_0. Le résultat de la question précédente est-il satisfaisant ?

Une description plus élaborée de la molécule d'eau fait intervenir l'étendue spatiale de l'ion O^{2-}, les ions H^+ étant toujours considérés comme ponctuels. Le champ créé par les ions H^+ perturbe la répartition de charge à l'intérieur de O^{2-}, et par conséquent modifie l'énergie d'interaction électrostatique des charges.

En première approche, étudions un atome constitué, selon le modèle simplifié de THOMSON (1904), d'un noyau de charge $+q$ réparti uniformément en volume dans une boule $\mathcal{B}$ de centre O et de rayon R, et d'électrons. Ces électrons sont représentés par une charge ponctuelle unique $-q$, soumise au champ du noyau (figure 3). La position de cette charge $-q$ à un instant quelconque est repérée par le point M.

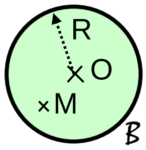

Figure 3

A8. Evaluer le champ électrique $\vec{E}_1(M)$ créé par le noyau seul en un point M intérieur à la boule $\mathcal{B}$, en fonction notamment de q, R et $\overrightarrow{OM}$.

A9. Exprimer la force de LORENTZ subie par la charge $-q$. En déduire sa position d'équilibre, repérée par le vecteur $\vec{r}_{éq}$, de la charge $-q$ dans le champ du noyau. L'équilibre est-il stable ?

L'atome est alors placé dans un champ électrique extérieur uniforme et stationnaire $\vec{E}_0$. Il sera admis que la distribution de charges du noyau n'est pas modifiée par l'action du champ $\vec{E}_0$.

A10. Quelle est la nouvelle position d'équilibre, repérée par $\vec{r}\,'_{éq}$, de la charge $-q$ en fonction de $\vec{E}_0$, q, ε_0 et R ? *(la valeur du champ $\vec{E}_0$ est supposée suffisamment faible pour que cette position d'équilibre se situe à l'intérieur de la sphère de centre R)*

A11. Montrer que l'atome acquiert alors un moment dipolaire $\vec{p}_i$ (dit induit) de la forme : $\vec{p}_i = \varepsilon_0\, \alpha_{pol} \vec{E}_0$, où α_{pol} sera exprimé en fonction de R.

Revenons au cas de la molécule d'eau. Elle est désormais modélisée par un ion oxygène O^{2-} de rayon R centré en O et de deux ions ponctuels H^+. L'angle $\measuredangle HOH$ est toujours noté 2θ et la distance du centre O à un ion H^+ vaut L (figure 4, représentant le plan de la molécule d'eau).

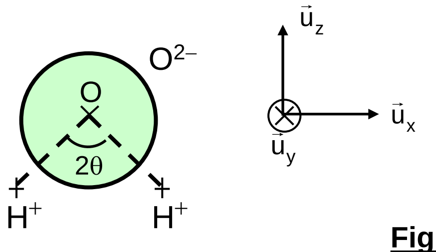

Figure 4

Le champ extérieur $\overrightarrow{E_0}$ modifiant la répartition de charge de l'ion O^{2-} est celui engendré par les deux ions H^+ au niveau du centre O de l'ion O^{2-}.

A12. Exprimer le champ $\overrightarrow{E_0}$ en fonction notamment de la charge élémentaire e, de L et de θ.

L'expression établie en question A11 donnant le moment dipolaire induit d'un atome est supposée toujours valable dans le cas de l'ion O^{2-}. L'énergie potentielle électrostatique associée à la déformation de la répartition de charge s'écrit alors : $W' = -\vec{p}_i \cdot \vec{E}_0/2$. Au final, l'énergie potentielle totale de la répartition de charge vaut $W_{tot} = W + W'$, où W a été déterminé à la question A5.

A13. Ecrire $W_{tot}(\theta)$ sous la forme : $W_{tot}(\theta) = \dfrac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 L}\left(A_1 + \dfrac{A_2}{\sin\theta} + A_3\cos^2\theta\right)$.

Déterminer les coefficients A_1, A_2 et A_3 en fonction de L et R.

A14. En déduire les positions d'équilibre. Les calculer sachant que le rayon de l'ion O^{2-} vaut $R \cong 1{,}0.10^{-10}$ m.

A15. Tracer l'allure de $W_{tot}(\theta)$ en fonction de θ. En déduire la stabilité des positions d'équilibre obtenues précédemment.

A16. Commenter ces résultats.