

le 06/04/2020

Module: physique Atomique (L2)

Chapitre 3:

Atome d'hydrogène et Atomes
d'hydrogéroïdes

L. MAGHLAOU

Sciences de la Matière

Faculté des Sciences exactes

Université de Constance 1

• Modèle de Bohr - Sommerfeld:

Sommerfeld a amélioré le modèle de Bohr en supposant

des orbites elliptiques en plus des orbites circulaires.

Ceci permet d'expliquer le doublement des raies spectrales

et les spectres d'émission d'un certain nombre d'atomes légers.

Il montre qu'il est nécessaire d'introduire deux nombres quantiques principaux n et l . On impose deux conditions

de quantification:

- Sur l'énergie $E_n = -R_H h c \frac{Z^2}{n^2}$.

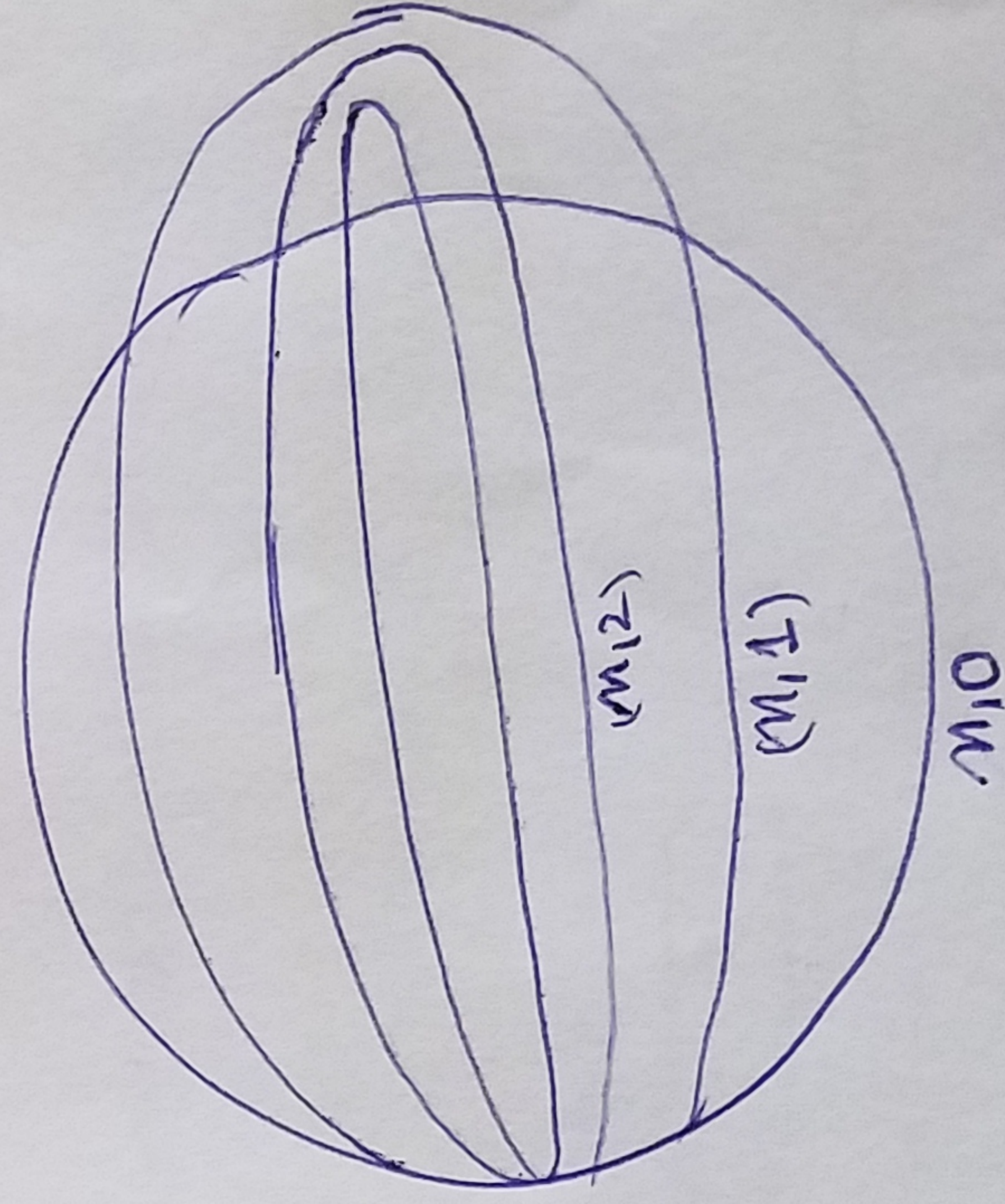
- Sur le moment cinétique $L = l h$

- $l < n \Rightarrow$ orbite elliptique

- $l = n \Rightarrow$ on retrouve l'atome de Bohr

- $l > n \Rightarrow$ impossible

(n, l)



Orbites permises pour le mouvement de l'électron autour du proton dans le modèle Sommerfeld. ①

Les limites du modèle de Bohr

- Le modèle de Bohr est satisfaisant pour l'atome d'hydrogène, il permet de retrouver les positions des raies du spectre en bon accord avec les observations expérimentales.
- En revanche il ne permet pas d'expliquer les phénomènes suivants

suivants

1- Effet Zeeman (structure fine): doublement des raies

du spectre en présence d'un champ magnétique

2- Spectre d'émission des atomes polyélectroniques

3. Le modèle de Bohr est en contradiction avec le

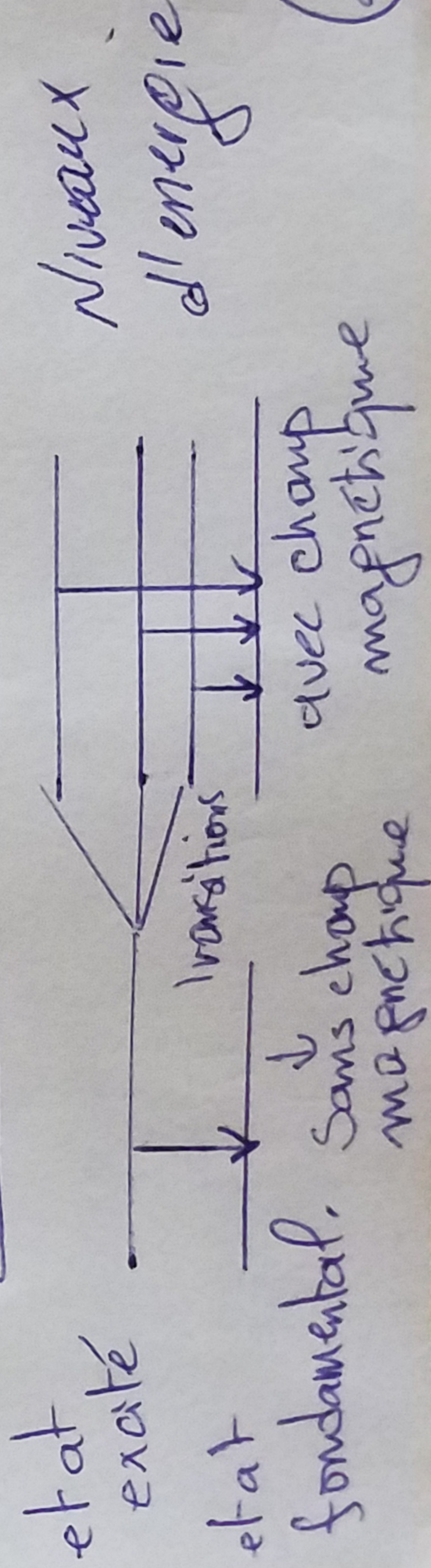
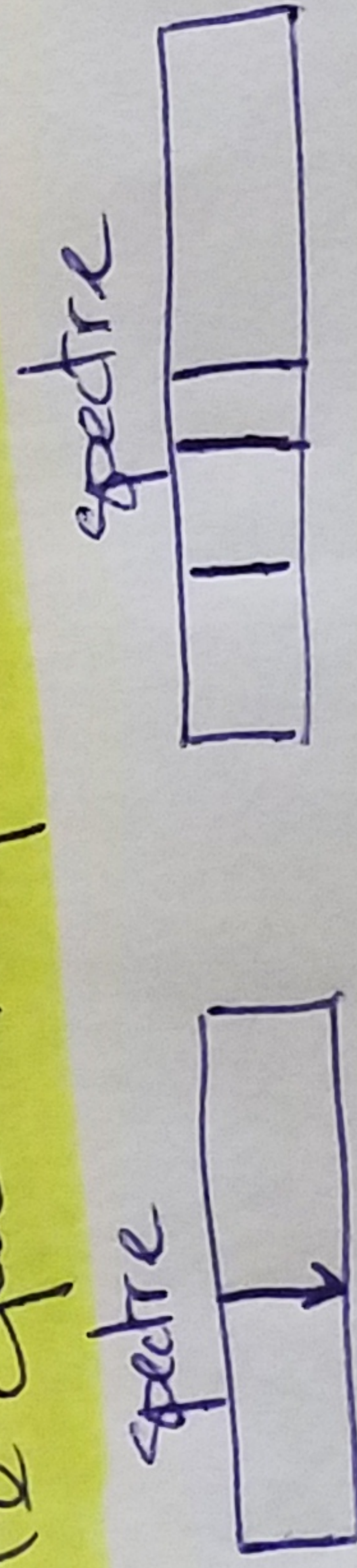
principe d'incertitude de Heisenberg (abandonner

l'idée de trajectoire pour un électron)

Il est nécessaire d'introduire la mécanique quantique

pour rendre compte observations expérimentales =>

Modèle quantique de l'atome d'hydrogène.



Modèle quantique de l'atome d'hydrogène

Nous rappelons que la fonction d'onde ψ vérifie l'équation de Schrödinger (1933):

$$H\psi = E\psi$$

E : énergie de la particule

H : opérateur Hamiltonien $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + \underbrace{V\psi}_{\text{énergie potentielle}} = E\psi$$

énergie cinétique

$$\text{Cas de l'électron: } H = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Solutions: nombre discret de couple (ψ_i, E_i)

- ψ_i : fonction d'onde propre = orbitale atomique (OA)
- E_i : énergie propre
- ψ_i^2 : densité de probabilité de présence de l'électron au niveau d'énergie E_i .

Introduction de 4 nombres quantiques (n, l, m_l, m_s) intervenant comme paramètres dans les fonctions d'onde et caractérisant les mouvements de l'électron autour du noyau.

• Une orbitale atomique (OA) est définie par les 3 nombres quantiques (n, l, m_l) : ψ_{n, l, m_l}

• Nombres quantiques liés à une orbitale atomique (OA)

• Le nombre quantique principal n : $n \in \mathbb{N}^*$, $n > 0$

La résolution de l'équation de Schrödinger donne les relations suivantes:

• Pour l'atome d'hydrogène ^1H : $E_n = -\frac{13,6}{n^2} \text{ eV}$

• Pour un hydrogénoïde $^Z\text{X}^{(Z-1)+}$: $E_n = -\frac{13,6}{n^2} Z^2 \text{ eV}$

Conclusion: l'énergie de l'électron ne dépend pas que

de n pour un atome hydrogénoïde.

Plus n augmente, plus E_n augmente.

Plus Z augmente, plus E_n diminue.

Rôle du nombre quantique n sur la forme de l'OA:

Plus n augmente, plus l'électron est éloigné du noyau et plus le nuage électronique décrit par l'OA est grand.

On dit que n décrit la couche énergétique de l'OA.

• Nombre quantique secondaire l : $0 \leq l \leq n-1$

Il définit la valeur du moment cinétique orbitale

$L = \hbar \sqrt{l(l+1)}$. Il correspond à une sous couche

n	1	2	3	4	5	6
Couche	K	L	M	N	O	P

n	1	2	3
l	0	1	0 1 2
Sous-couche	1S	2S 2P	3S 3P 3d

Rôle du nombre quantique l
 le nombre l renseigne sur la forme générale du nuage
 électrique décrit par l'OA. on dit que l décrit la sous
 couche énergétique de l'OA.

- Le nombre quantique magnétique m_l : $-l \leq m_l \leq l$

Le nombre m_l renseigne sur l'orientation et la forme
 précise du nuage électrique décrit par l'OA.
 m_l explique aussi la structure fine (doublement des raies
 du spectre en présence d'un champ magnétique dirigé
 selon oz): $h_z = m_l h$.

l	0	1	2
m_l	0	-1 0 1	-2 -1 0 1 2
OA	1OA: S	3OA: P _x , P _y , P _z	5OA: d

Le triplet (n, l, m_l) définit une orbitale atomique.