

le 06/04/2020

Module: physique Atomique (L2)

Chapitre 3:

Atome d'hydrogène et Atomes
d'hydrogéroïdes

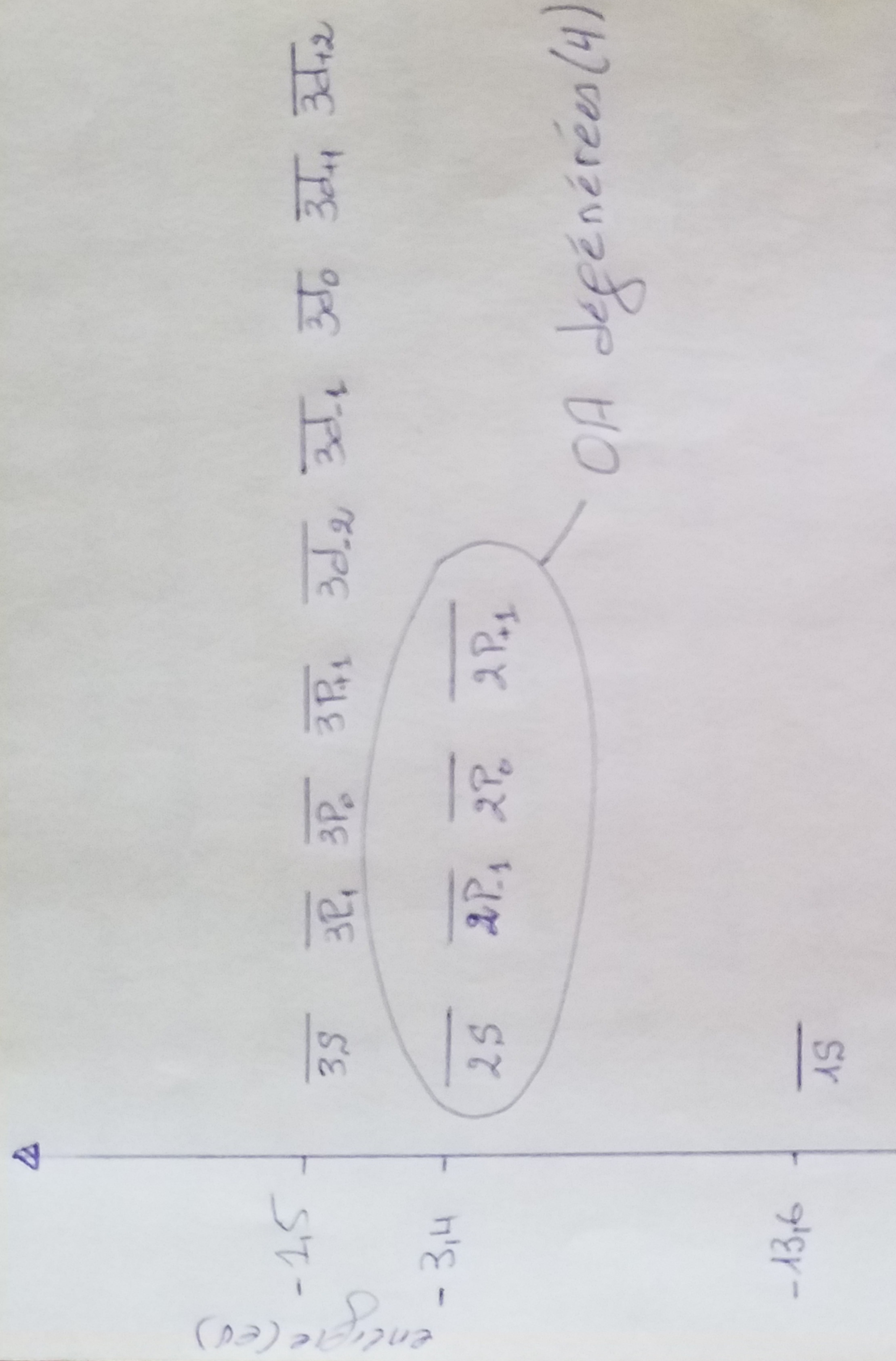
L. MAGHLAOU

Sciences de la Matière

Faculté des Sciences exactes

Université de Constance 1

• Diagramme énergétique des OA de l'atome d'hydrogène



Plusieurs orbitales peuvent correspondre à une même valeur d'énergie (même n pour H et hydrogénoïdes).

On dit qu'il y a dégénérescence des niveaux d'énergie

Exemple : le niveau $n=2$ correspond à 4 orbitales

(2s, 2p_x, 2p_y, 2p_z) de même énergie.

Nombre quantique de spin m_s : ($m_s = +\frac{1}{2}$, $m_s = -\frac{1}{2}$)

Expérience de Stern-Gerlach. Dans cette expérience réalisée

en 1921, on fait passer des atomes d'argent dans un champ magnétique non uniforme. Dans leur état fondamental l'atome

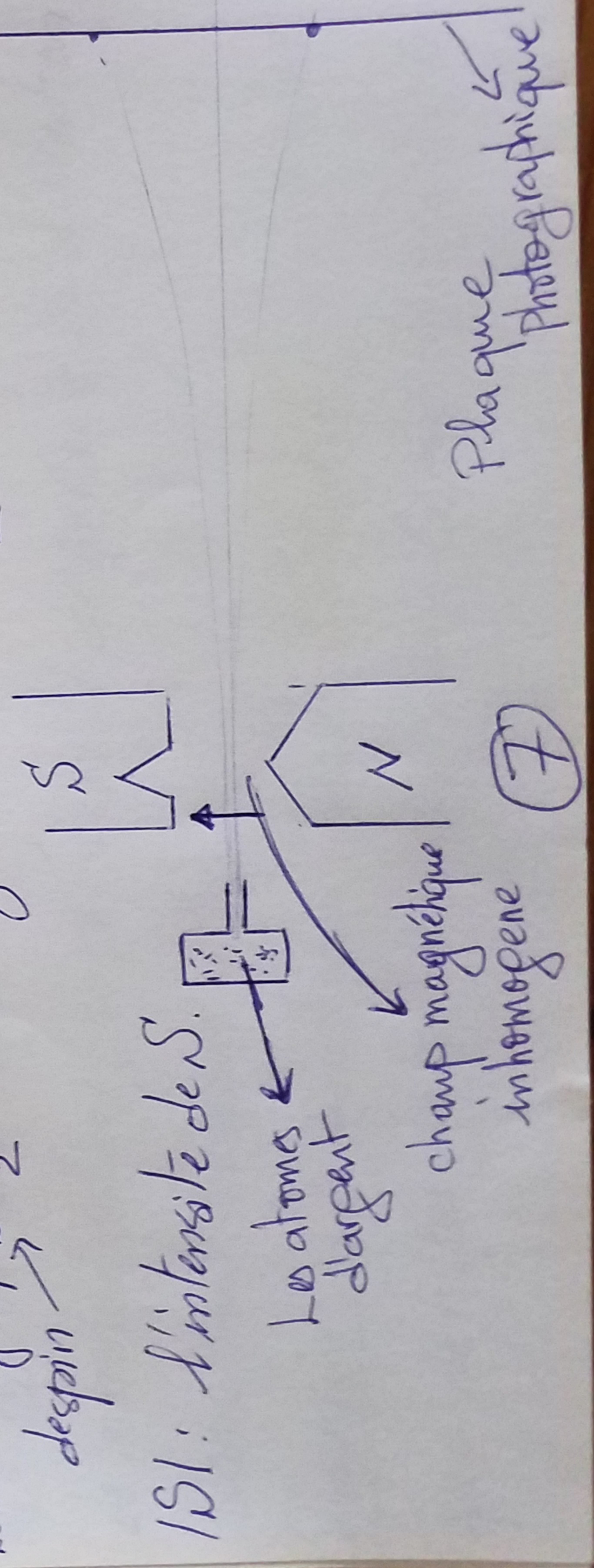
d'argent ont un moment magnétique orbital nul. En physique classique, le faisceau ne devrait pas subir d'influence du champ magnétique. Or on constate une séparation en deux du faisceau. On explique ce phénomène en introduisant le moment cinétique de spin ou spin de nature quantique comparable à un moment cinétique intrinsèque.

L'électron étant une particule chargée, son spin engendre un moment magnétique intrinsèque $\mu = -g \frac{e}{2m} \vec{S}$. Pour une direction arbitraire (oz), les composantes de \vec{S} sont

$S_z = \pm \frac{1}{2} \hbar$. Les valeurs possibles du moment magnétique sont: $\mu_z = \pm \mu_B$ avec: $\mu_B = \frac{e \hbar}{2 m e}$ (magneton de Bohr)

• l'énergie d'un moment magnétique dans un champ \vec{B} :
 $E_B = - \vec{\mu} \cdot \vec{B}$

• l'intensité de \vec{S} est: $|\vec{S}| = \sqrt{S(S+1)} \hbar = \sqrt{\frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1)} \hbar = \sqrt{\frac{3}{2}} \hbar$.
 Le nombre magnétique $S = \frac{1}{2}$ despin \rightarrow $S_z = \pm m_s \hbar = \pm \frac{1}{2} \hbar$ / $m_s = \pm \frac{1}{2}$.



• La forme spatiale des orbitales atomiques Ψ_{n,l,m_l}

La résolution de l'équation de Schrödinger pour l'atome d'hydrogène donne l'expression suivante:

$$\Psi_{n,l,m_l}(r, \theta, \varphi) = R_{n,l}(r) Y_{l,m_l}(\theta, \varphi)$$

$R_{n,l}(r)$ représente la partie radiale.

$Y_{l,m_l}(\theta, \varphi)$: représente la partie angulaire.

Les orbitales atomiques simples ont pour expression

analytique: $\Psi_{100} = 1S = A_1 \exp\left[-\frac{r}{a_0}\right]$

$$\Psi_{200} = 2S = A_2 \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) \exp\left[-\frac{r}{2a_0}\right]$$

a_0 : est le rayon de la première orbite de Bohr.

A_1 et A_2 sont des constantes se déduisant de la condition de normalisation (la probabilité de présence de l'électron dans tout l'espace = 1)

Remarque: Les fonctions d'onde $1S$ et $2S$ ne dépendent que de r (pas des parties angulaires). Ce sont des orbitales

atomiques (OA) de symétrie sphérique:

$$\psi_{210} = 2P_0 = B_0 \exp\left[-\frac{r}{2a_0}\right] \cos\theta$$

$$\psi_{211} = 2P_{11} = B_2 \exp\left[-\frac{r}{2a_0}\right] \sin\theta \cos\theta \varphi$$

$$\psi_{20-1} = 2P_{-1} = B_2 \exp\left[-\frac{r}{2a_0}\right] \sin\theta \sin\theta \varphi$$

Les fonctions d'onde ψ ne dépendent que de r et des paramètres angulaires (θ et φ). Ce sont de OA directionnelles.

• Probabilité élémentaire de présence:

$$dP = \psi^2 dV = \psi^2 r^2 dr \sin\theta d\theta d\varphi = dP(r) dP(\theta, \varphi)$$

$$\text{avec: } dP(r) = R_{nl}^2 r^2 dr, \quad dP(\theta, \varphi) = Y_{lm}^2(\theta, \varphi) \sin\theta d\theta d\varphi$$

$$\text{avec: } dP(r) = R_{nl}^2 r^2 dr, \quad D(r) = \frac{dP(r)}{dr} = R_{nl}^2 r^2$$

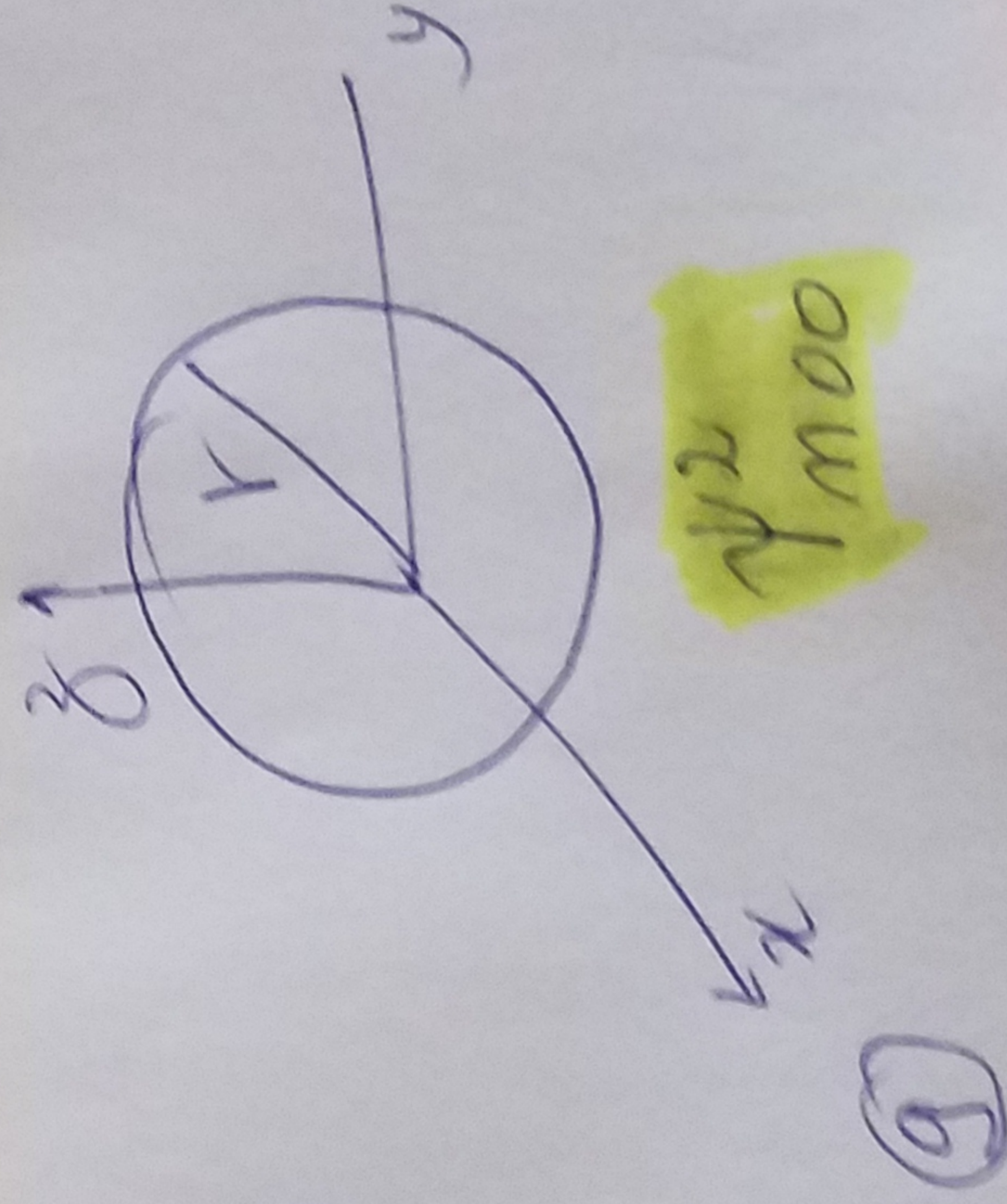
Densité de probabilité radiale: $\psi_{nl, m}$

• Représentation des orbitales atomiques $\psi_{nl, m}$

• ψ_{100} : orbitales 1S

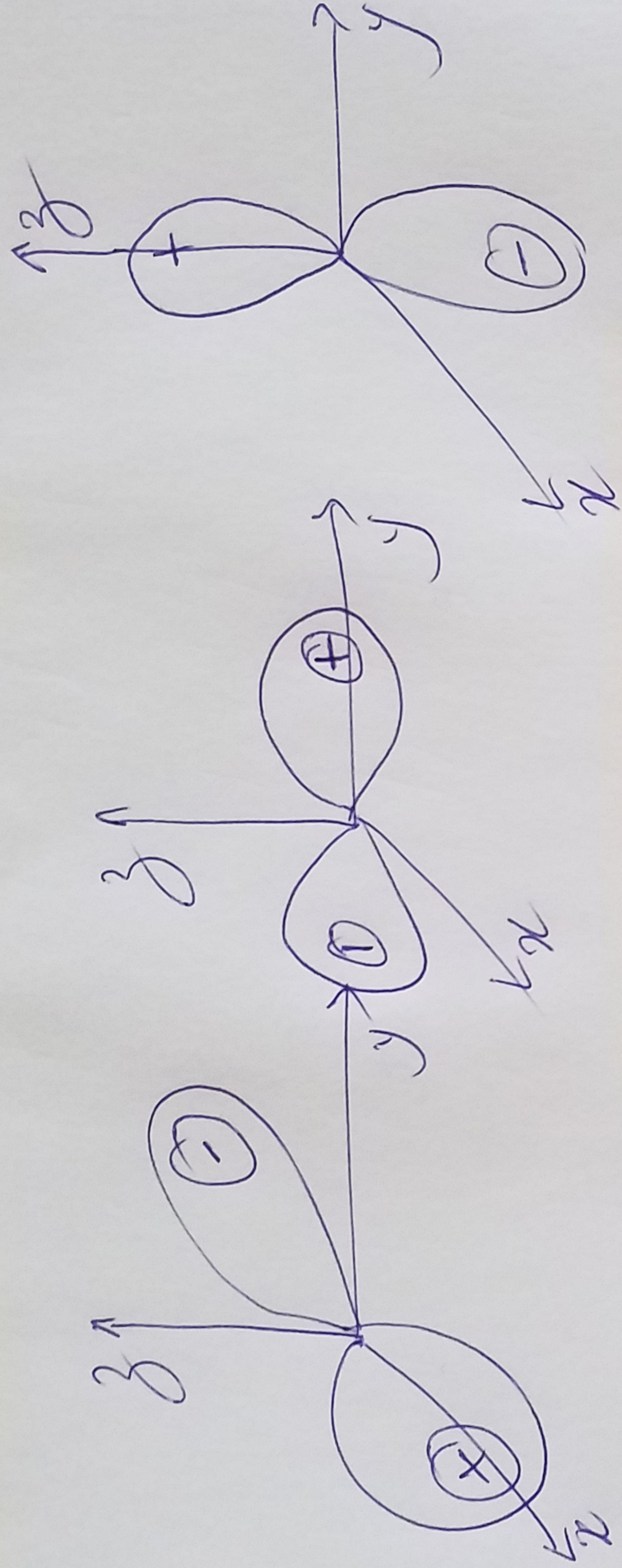
en a une symétrie sphérique

(ne dépendent pas de θ et φ)



⑨

• ψ_{n1m} ($m = -1, 0, 1$) orbitales P_x, P_y et P_z



La representación de ψ_{n1m}