Chapitre III : Atome d'hydrogène et ions hydrogénoïdes

Description des atomes par la mécanique quantique

Atomistique

I-ASPECTS DE LA MECANIQUE QUANTIQUE : 4

1- Dualité onde-corpuscules 4

a- Dispositif expérimental 4

b- Diffraction d'un faisceau d'électrons 5

c- Relation de De Broglie 5

2- Spectre d'émission ou d'absorption des atomes : obtention d'une série de raies discrètes d'émission ou d'absorption 6

a- Dispositif expérimental et spectre d'émission de l'atome d'hydrogène 6

b- Quantification des niveaux énergétiques électroniques 6

c- Formule expérimentale de Ritz et Rydberg 7

d- Spectres d'absorption 7

3- Relation d'incertitude d'Heisenberg 8

a- Approche qualitative de la relation d'incertitude d'Heisenberg : 8

b- Relations 9

II- ATOME D'HYDROGENE OU ION HYDROGENOÏDE : *DESCRIPTION DANS LA MECANIQUE QUANTIQUE* 9

1- Fonction d'onde 9

a- Equation de Schrödinger 9

b- Signification de la fonction d'onde : densité volumique de probabilité de présence 11

2- Résultats de la résolution de l'équation de Schrödinger 12

a- Niveaux énergétiques électroniques 12

b- Fonction d'onde électronique n,l,m 13

 © EduKlub S.A.
Tous droits de l'auteur des œuvres réservés. Sauf autorisation, la reproduction ainsi que toute utilisation des œuvres autre que la consultation individuelle et privée sont interdites.

Extrait gratuit de document, le document original comporte 19 pages.

c- Dégénérescence des niveaux énergétiques 15

3- Nomenclature des fonctions d'onde et allure des fonctions d'onde 15

a- Nomenclature des fonctions d'onde 15

b- Allure des fonctions d'onde 16

c- Conséquence 16

4- Nombre quantique de spin 17

a- Expérience de Stern et Gerlach 17

b- Nombre quantique de spin électronique 18

 © EduKlub S.A.
Tous droits de l'auteur des œuvres réservés. Sauf autorisation, la reproduction ainsi que toute utilisation des œuvres autre que la consultation individuelle et privée sont interdites.

Extrait gratuit de document, le document original comporte 19 pages.

Chapitre III : Atome d'hydrogène et ions hydrogénoïdes

Description des atomes par la mécanique quantique

Atomistique

Le but de ce cours est de donner une description *via* la ***mécanique quantique*** de l'atome d'hydrogène et de l'ion hydrogénoïde constitué d'un noyau et d'un électron.

Le noyau sera supposé immobile et les électrons seront décrits par le couple fonction d'onde, Ψ ,- énergie associée à la fonction d'onde, E, la fonction d'onde étant une solution d'une équation différentielle, l'***équation de Schrödinger***, qui s'écrit :

$$\tilde{\mathrm{H}} \cdot \Psi = E\,\Psi$$

avec $\tilde{\mathrm{H}}$ opérateur Hamiltonien,

Ψ fonction d'onde et E énergie associée à la fonction d'onde

Un certain nombre d'expérience mettent en défaut la mécanique quantique dont l'étude des spectres d'émission ou d'absorption de l'atome d'hydrogène. Ils seront interprétés à partir des résultats (à admettre de mécanique quantique) et la formule expérimentale de Riz et Rydberg sera démontrée théoriquement.

Le prolongement de cours, vu en classe de PCSI et PC est la description quantique des atomes polyélectroniques puis des molécules à travers :

- la théorie des orbitales moléculaires appliquées aux molécules diatomiques (classe de PCSI) ;
- la théorie du champ cristallin appliquée aux complexes des métaux de transition octaédriques (classe de PCSI) ;
- la théorie de Hückel appliquée à la description des orbitales moléculaires Π des électrons d'un système conjugué (classe de PC).

Ces théories permettront respectivement d'interpréter par exemple :

- le paramagnétisme du dioxygène (interaction des molécules avec un champ magnétique $\vec{\mathrm{B}}$);
- l'aspect coloré et les propriétés magnétiques des complexes des métaux de transition ;
- les réactions de cycloaddition de Diels-Alder entre un diène et un diénophile (par exemple entre le butadiène et l'éthylène conduisant à la formation de cyclohexène).

 © EduKlub S.A.
Tous droits de l'auteur des œuvres réservés. Sauf autorisation, la reproduction ainsi que toute utilisation des œuvres autre que la consultation individuelle et privée sont interdites.

Extrait gratuit de document, le document original comporte 19 pages.

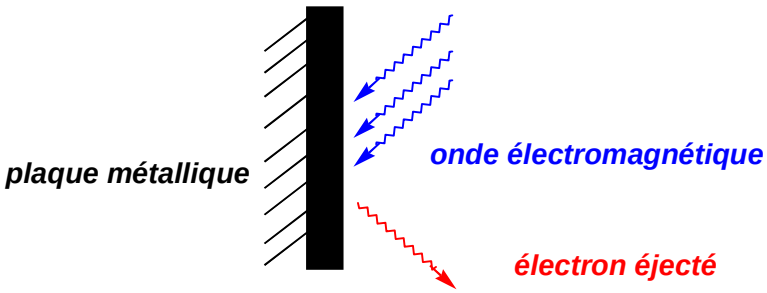
I-Aspects de la mécanique quantique :

Un certain nombre d'expériences ont mis en défaut la mécanique classique, leur interprétation se faisant à partir de la *mécanique quantique*.

1- Dualité onde-corpuscules

a- Dispositif expérimental

Lorsqu'une plaque métallique est irradiée par une onde électromagnétique (lumière), il y a éjection d'électrons du métal à partir d'une certaine fréquence minimale, ν_{min} :

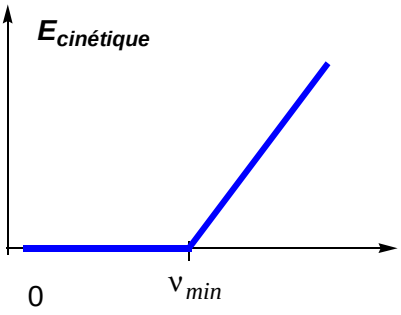


Effet photoélectronique

L'énergie cinétique de l'électron est facilement mesurée et est reliée à la fréquence de l'onde électromagnétique, ν, selon une loi :

$$h \cdot \nu = h \cdot \nu_{min} + \frac{1}{2} \cdot m_e \cdot v^2$$

avec v vitesse de l'électron éjecté et ν_{min} fréquence minimale d'éjection de l'électron



Einstein émet alors l'hypothèse que la lumière est transportée par une particule, de masse nulle, ***le photon***, d'énergie :

$$\varepsilon = h \cdot \nu$$

avec h constante de Planck, $h = 6{,}63 \cdot 10^{-34}$ J · s et ν fréquence de la lumière

© EduKlub S.A.
Tous droits de l'auteur des œuvres réservés. Sauf autorisation, la reproduction ainsi que toute utilisation des œuvres autre que la consultation individuelle et privée sont interdites.

Extrait gratuit de document, le document original comporte 19 pages.

La fréquence ν de la lumière est reliée à sa longueur d'onde λ selon :

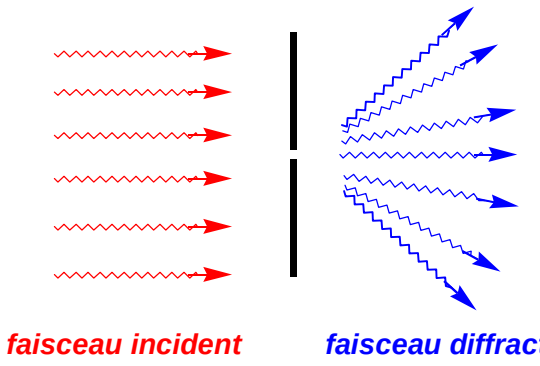
$$\lambda = \frac{c}{\nu}$$

avec c célérité de la lumière, $c = 3 \cdot 10^8 \ m \cdot s^{-1}$

Il y a dualité onde-corpuscule, la lumière étant une onde électromagnétique (superposition d'un champ électrique et magnétique perpendiculaires) qui a un « comportement » de particules, le photon.

b- Diffraction d'un faisceau d'électrons

Un faisceau d'électrons traversant une plaque dans laquelle se situe une ouverture étroite est diffracté. ***Il y a dualité particule-onde*** :



Diffraction d'un faisceau d'électrons

Un faisceau de particules, des électrons, peuvent avoir un comportement ondulatoire.

c- Relation de De Broglie

La dualité onde-corpuscule se traduit par la ***relation de De Broglie*** qui relie le phénomène ondulatoire, la longueur d'onde λ, au phénomène corpusculaire, la quantité de mouvement :

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

avec λ longueur d'onde, h constante de Planck et p, quantité de mouvement :

$p = m \cdot \vec{v}$ d'unité : $kg \cdot m \cdot s^{-1}$ avec m masse de la particule et $\vec{v}$ sa vitesse

Noter l'homogénéité de la relation, une énergie pouvant s'exprimer en $kg \cdot (m \cdot s^{-1})^2$.

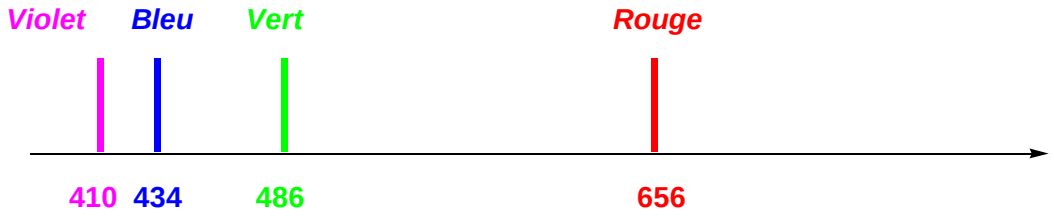
© EduKlub S.A.
Tous droits de l'auteur des œuvres réservés. Sauf autorisation, la reproduction ainsi que toute utilisation des œuvres autre que la consultation individuelle et privée sont interdites.

Extrait gratuit de document, le document original comporte 19 pages.

2- Spectre d'émission ou d'absorption des atomes : obtention d'une série de raies discrètes d'émission ou d'absorption

a- Dispositif expérimental et spectre d'émission de l'atome d'hydrogène

Des atomes d'hydrogène dans un état énergétique excité, obtenus à partir de dihydrogène et par décharge électrique d'un condensateur et contenus dans une ampoule dans laquelle un vide primaire est réalisé, émettent de la lumière. Les fréquences ou longueurs d'onde des raies émises ne sont pas continues mais discrètes, longueur d'onde située dans l'UV lointain, $\lambda < 200$ nm ou le visible :



Partie du spectre d'émission d'un atome d'hydrogène dans le visible

b- Quantification des niveaux énergétiques électroniques

Cette expérience conduit à la conclusion suivante :

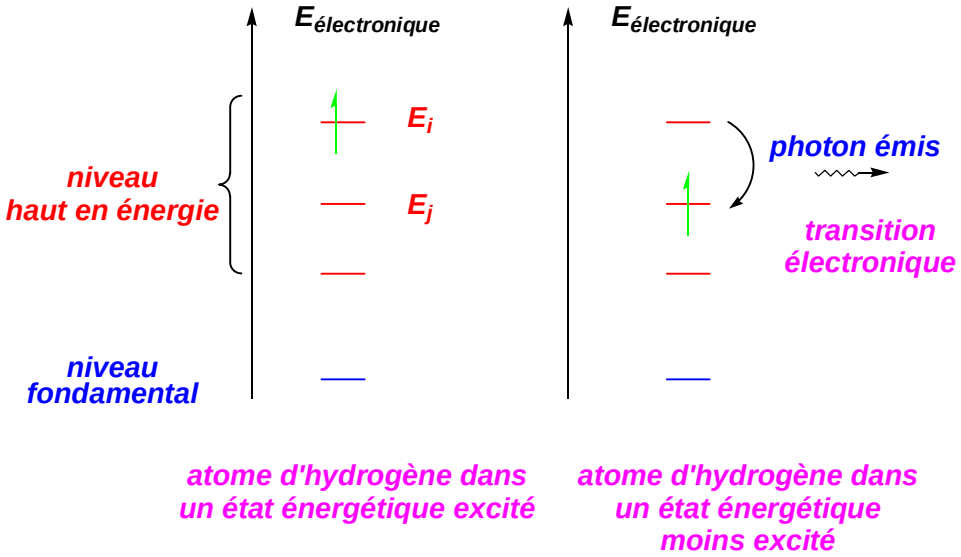
Les niveaux énergétiques électroniques de l'atome d'hydrogène sont discrets ou non continus : on dit qu'ils sont quantifiés.

En effet, l'énergie du noyau étant prise nulle puisque celui-ci peut être considéré comme immobile, seul l'électron est excité lorsque l'atome d'hydrogène l'est. Lorsque la désexcitation cesse, l'électron va avoir tendance à « revenir » vers un niveau plus bas en énergie, puis vers le niveau énergétique le plus bas, nommé ***niveau fondamental***. Le passage d'un niveau énergétique à un autre est nommé ***transition électronique***. Par conservation de l'énergie, la transition électronique s'accompagne alors de l'émission d'un photon, dont l'énergie est égale à un écart énergétique permis entre les 2 niveaux énergétiques concernés lors de la transition.

Si les niveaux énergétiques électroniques permis étaient continus, il y aurait une infinité possible de raies émises. Les raies étant discrètes, ces mêmes niveaux le sont : ils sont ***quantifiés***.

Tous droits de l'auteur des œuvres réservés. Sauf autorisation, la reproduction ainsi que toute utilisation des œuvres autre que la consultation individuelle et privée sont interdites.

Extrait gratuit de document, le document original comporte 19 pages.



Emission d'un atome d'hydrogène

Il s'agit d'un résultat propre à la mécanique quantique et donc aux objets quantiques car un mécanique classique, un objet classique a un continuum énergétique.

c- Formule expérimentale de Ritz et Rydberg

Ritz et Rydberg ont montré expérimentalement que le nombre d'onde, $\sigma^{\text{émis}}$, inverse de la longueur d'onde de la radiation émise, $\sigma^{\text{émis}} = \frac{1}{\lambda^{\text{émis}}}$, est reliée à une constante, la constante de Rydberg, et à l'inverse du carré de nombres entiers selon la formule :

$$\sigma^{\text{émis}} = \frac{1}{\lambda^{\text{émis}}} = -R_H \cdot \left(\frac{1}{i^2} - \frac{1}{j^2} \right)$$

Formule de Ritz et Rydberg

avec R_H constante de Rydberg et i,j des entiers naturels non nuls, $i > j$.

et $R_H = 10979708{,}014 \pm 0{,}013\ m^{-1}$ mesurée avec une grande précision !

d- Spectres d'absorption

Lorsqu'on étudie les processus d'absorption, on constate que l'atome d'hydrogène absorbe certaines radiations électromagnétiques et qu'elles sont discrètes. On arrive à la même conclusion :

Les niveaux énergétiques électroniques de l'atome d'hydrogène sont quantifiés.

© EduKlub S.A.
Tous droits de l'auteur des œuvres réservés. Sauf autorisation, la reproduction ainsi que toute utilisation des œuvres autre que la consultation individuelle et privée sont interdites.

Extrait gratuit de document, le document original comporte 19 pages.