
R 21

Atomistique



21.1 Sources et évolution de la mécanique quantique

21.1.1 Loi de Planck

Une onde de fréquence ν peut être représentée comme un paquet de photons. Chaque photon possède une énergie E définie par :

$$E = h\nu$$

Avec h , la constante de Planck :

$$h = 6,62 \cdot 10^{-34} \text{ J.s}$$

On introduit aussi \hbar , défini par :

$$\hbar = \frac{h}{2\pi}$$

Or, comme : $\lambda = cT$, on obtient :

$$E = \frac{hc}{\lambda}$$

Cette énergie est exprimée en Joules.

21.1.2 Formule de Ritz

Soit $\sigma = \frac{1}{\lambda}$ le nombre d'onde. La formule de Ritz est :

$$\sigma = R_H \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)$$

Avec :

$$\begin{cases} R_H = 10979708 \text{ m}^{-1} \\ n : \text{Le nombre principal de la série (ex : 2 pour l'hydrogène)} \\ m : \text{Entier supérieur à } n, \text{ que l'on fait varier pour trouver la série : } m = n + 1, m = n + 2, \dots \end{cases}$$

21.1.3 Énergie de l'atome d'hydrogène

En utilisant comme unité l'électron-volt défini par : $1\text{eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$, on obtient l'énergie de l'atome dans un niveau n :

$$E_n = -\frac{13,6}{n^2}$$

n est appelé nombre quantique principal.

21.1.4 Énergie d'un ion hydrogénoïde

Un ion hydrogénoïde est un édifice monoatomique monoélectrique, donc qui ne comporte qu'un seul électron.

On définit les relations suivantes pour ce type d'ion :

$$\begin{cases} E_n = -13,6 \left(\frac{Z}{n} \right)^2 \\ r_n = n^2 \left(\frac{a_0}{Z} \right) \end{cases}$$

Avec :

$$\begin{cases} Z = \text{Numéro atomique du noyau} \\ a_0 = \text{Rayon de Bohr} \end{cases}$$



21.1.5 Longueur d'onde de De Broglie

On définit la longueur d'onde de De Broglie pour tout corpuscule en mouvement par :

$$\lambda_{dB} = \frac{h}{p}$$

Avec p la quantité de mouvement du corpuscule.

21.2 Expérience de Franck et Hertz

Cette expérience a été réalisée pour la première fois en 1914 par deux physiciens allemands : Gustav Hertz et James Franck, d'où son nom. Le but était de comprendre l'interaction entre un faisceau d'électrons et un gaz atomique (du mercure gazeux). Franck et Hertz ont pu déduire de leurs résultats que les échanges d'énergie au niveau microscopique sont quantifiés, c'est-à-dire que la quantité d'énergie échangée ne peut prendre que certaines valeurs particulières. Ils reçurent le prix Nobel de physique en 1925 pour leur découverte des lois régissant la collision d'un électron sur un atome.

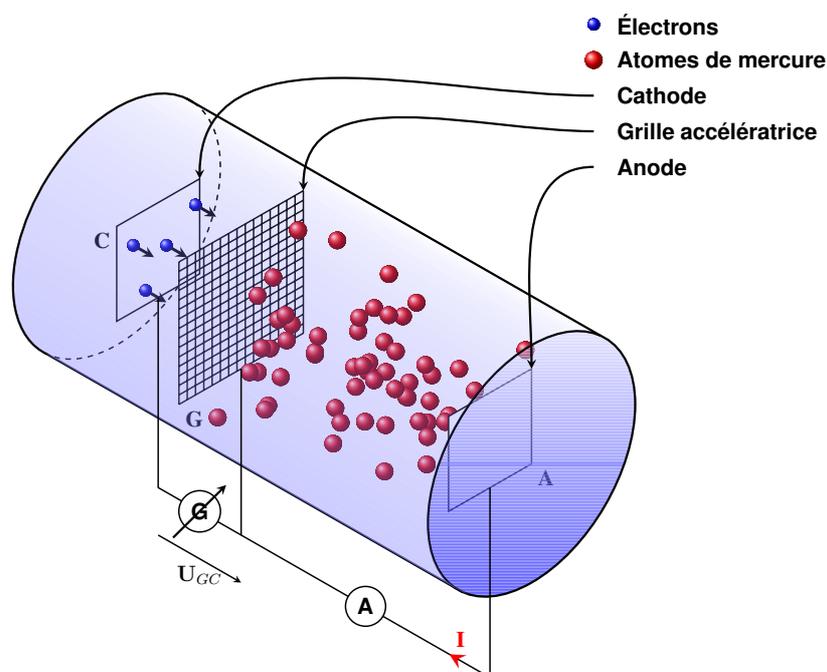


FIGURE 21.1 – Expérience de Franck et Hertz

21.3 Fonction d'onde, nombres quantiques

21.3.1 Fonction d'onde



— Fonction d'onde —

Une fonction d'onde est définie comme une solution de l'équation de Schrödinger. Cette variable est une variable d'espace, elle oblige donc l'existence de trois paramètres, appelés nombres quantiques.

Pour une valeur donnée de n , il existe n^2 fonctions d'ondes. On dit que le niveau d'énergie est dégénéré de degrés n^2 .

21.3.2 Nombres quantiques

21.3.2.1 Nombre quantique principal

Ce nombre quantique quantifie l'énergie, il est noté n . Il est utilisé dans la quantification de l'énergie d'un ion hydrogénoïde.

21.3.2.2 Nombre quantique orbital

Ce nombre quantique quantifie le moment cinétique, il est noté ℓ . En mécanique quantique, le module du moment cinétique est :

$$L^2 = \ell(\ell + 1)\hbar^2$$

Il ne peut prendre que certaines valeurs :

$$0 \leq \ell \leq n - 1$$

21.3.2.3 Nombre quantique magnétique

Ce nombre quantique, noté m_ℓ , quantifie la projection d'un moment cinétique sur un champ magnétique \vec{B} extérieur. Soit L_z la projection du moment cinétique sur l'axe $z'z$:

$$L_z = m_\ell \hbar$$

Les valeurs que peut prendre m_ℓ sont :

$$-\ell \leq m_\ell \leq \ell$$

21.3.2.4 Spin

Ce nombre quantique, noté m_s , quantifie le moment cinétique intrinsèque de l'électron. Il ne peut prendre comme valeur que $\pm \frac{1}{2}$

La quadruplet suivant (n, ℓ, m_ℓ, m_s) définit un état quantique. À une valeur de n correspond $2n^2$ états quantiques.

21.3.3 Orbitale atomique

On associe aux différentes valeurs du nombre quantique ℓ une lettre :

ℓ	0	1	2	3	4
Lettre	<i>s</i>	<i>p</i>	<i>d</i>	<i>f</i>	<i>g</i>

On obtient l'écriture suivante :

$$\psi_{(n,\ell,m_\ell)} = n \text{ Lettre } m_\ell$$

Exemple :

$$\psi_{(3,1,-1)} = 3p_{-1}$$

21.4 Atomes polyélectroniques

Un système peut être caractérisé dans la mécanique quantique par le quadruplet (n, ℓ, m_ℓ, m_s) .

21.4.1 Règle de Klechkowski

Cette règle définit la façon de remplir les orbitales orbitales atomiques.

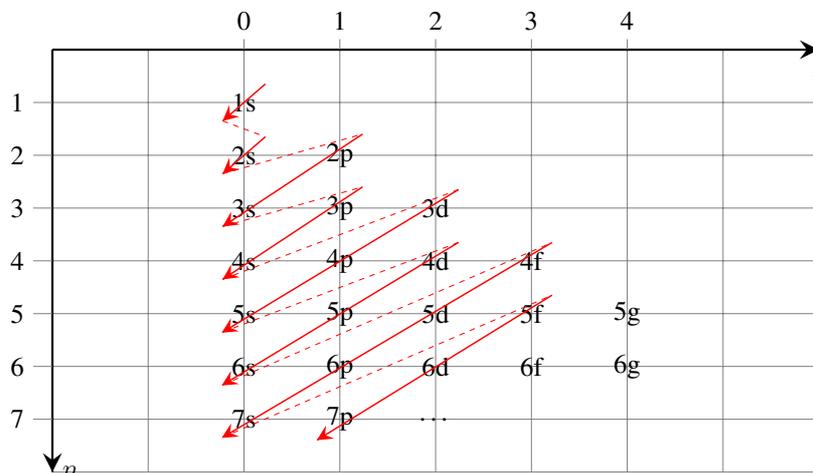


FIGURE 21.2 – Illustration de la règle de Klechkowski

21.4.2 Configuration électronique d'un atome

21.4.2.1 Principe de stabilité



— Principe de stabilité —

Connaissant l'évolution des niveaux énergétiques des différentes orbitales atomiques d'un atome à N électrons, le remplissage des orbitales atomiques se fait dans le sens des énergies croissantes.

21.4.2.2 Principe d'exclusion de Pauli



— Principe d'exclusion de Pauli —

Dans un atome polyélectronique, deux électrons ne peuvent être dans le même état quantique.

Ceci implique que sur chaque orbitale atomique, on peut mettre au maximum deux électrons antiparallèles.

21.4.2.3 Principe de Hund



— Principe de Hund —

Quand on place des électrons dans des orbitales atomiques, dégénérées, les électrons occupent un maximum d'orbitales atomiques, avec des spins parallèles. C'est seulement quand toutes les orbitales atomiques sont occupées par des spins parallèles que l'on rajoute des électrons en spins antiparallèles.

21.4.2.4 Configuration électronique

Considérons l'atome d'oxygène ($Z = 8$) dans son état fondamental, on peut établir le diagramme énergétique suivant :

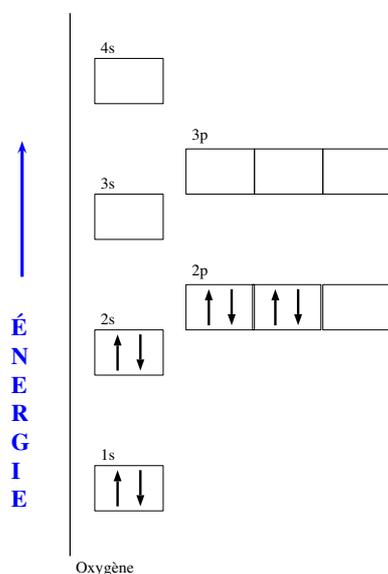
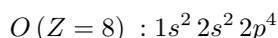


FIGURE 21.3 – Diagramme énergétique de l'oxygène

On écrit cette configuration électronique sous la forme :



On définit deux états :

- paramagnétique : Tous les électrons ne sont pas appariés. Le système peut donc facilement capter ou céder des électrons.
- diamagnétique : Tous les électrons sont appariés. Le système est "solide".

La dernière règle est que quand on remplit une couche dégénérée, on classe toujours, dans la configuration électronique, les éléments par valeur de n .

21.4.3 Ionisation d'un atome



— Énergie d'ionisation —

On appelle énergie de première ionisation E_{i_1} l'énergie minimale à fournir pour arracher un électron à un atome gazeux dans son état fondamental.

Cette énergie est positive, c'est-à-dire qu'un atome a besoin d'énergie pour perdre un électron, il ne peut pas en céder spontanément.

21.5

Classification périodique des éléments



— Électrons de valence —

Les électrons de valence sont les électrons qui appartiennent à la couche extérieure.

Les éléments sont classés, dans le tableau de Mendeleïev, par ordre croissant de numéro atomique, et d'après leurs propriétés physicochimiques. Ces propriétés sont dues aux électrons de valence.

Voici une classification périodique simplifiée.

Colonne												8												
Groupe	1											2						3	4	5	6	7	8	
		H											He											
		Li	Be											B	C	N	O	F	Ne					
		Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar					
	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr						
		Période																						

FIGURE 21.4 – Tableau périodique simplifié

