

QUANTIFICATION DE L'ÉNERGIE DES ATOMES

I. QUELQUES RAPPELS SUR L'ATOME

La dimension d'un atome est d'environ 10^{-10} m. L'atome est noté de façon générale : A_ZX .

Considérons l'atome ${}^{235}_{92}\text{U}$.

L'atome d'uranium 235 est constitué d'un noyau et d'électrons :

- **Noyau** : La dimension du noyau est d'environ 10^{-15} m. Il contient **toute la masse de l'atome**. Le noyau est constitué de Z protons (de masse m_p , de charge $e = 1,6 \times 10^{-19}$ C) et de N neutrons (de masse $m_n \approx m_p = 1,67 \times 10^{-27}$ kg). On définit le nombre de masse A tel que : $A = Z + N$. Pour l'atome d'uranium 235, $Z = 92$ et $A = 235$.
- **Électrons** : Comme l'atome est électriquement neutre, il y a autant d'électrons que de protons. L'électron a une masse très faible $m_e = 9,1 \times 10^{-31}$ C. On retient que $\frac{m_p}{m_e} = 1836 \approx 2000$.

On définit Z le numéro atomique. Il correspond au nombre de protons.

On appelle **isotopes** deux atomes qui ont le même nombre de protons mais un nombre de neutrons différent. Exemple : l'uranium 235 et l'uranium 238 sont des isotopes car ils ont 92 protons et un nombre de neutrons différents.

L'unité de masse atomique est définie comme 1/12 de la masse d'une mole de ${}^{12}_6\text{C}$. $1 \text{ UMA} = 1,66 \times 10^{-27}$ kg

L'élément chimique est défini par la donnée du numéro atomique Z , nombre de protons du noyau correspondant.

La notion d'élément est plus générale que celle d'atome.

- Deux isotopes (nombre de neutrons différent mais même nombre de protons) appartiennent au même élément. Ex : H et D.
- Un atome et un ion formé à partir de cet atome (nombre d'électrons différent mais même nombre de protons) appartiennent au même élément chimique. Ex Cl et Cl^- .

On va étudier dans ce chapitre l'atome hydrogénéoïde. On dit également ion hydrogénéoïde : c'est un atome ou un ion qui ne renferme qu'un seul électron. Exemple : H, He^+ , Li^{2+} ...

II. ORIGINE EXPÉRIMENTALE DE LA QUANTIFICATION

II.1 Émission d'énergie lors de la désexcitation

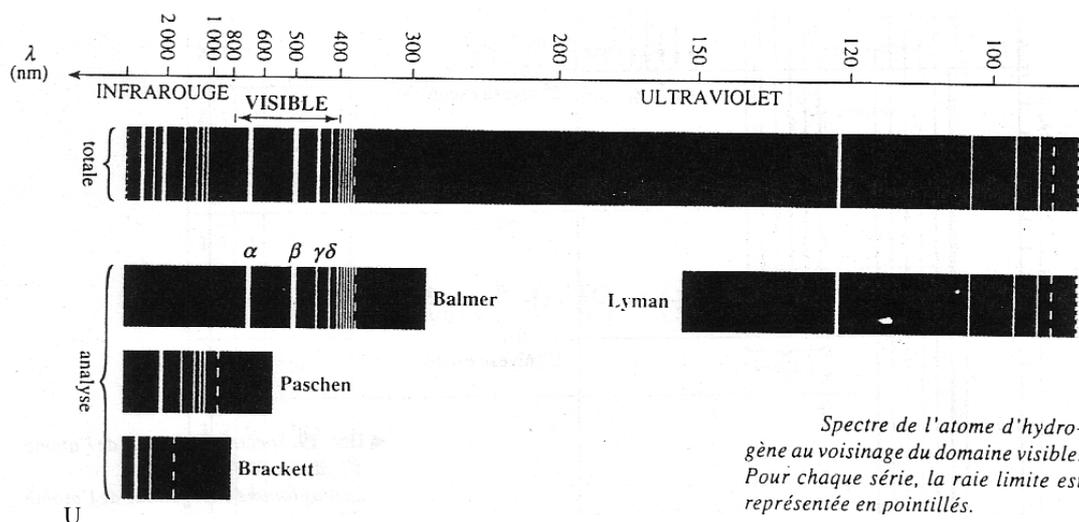
En physique classique, un système peut échanger de l'énergie par quantité quelconque aussi petite que souhaité : on dit que l'énergie s'échange de façon continue. La situation est différente pour les atomes.

Si le système atomique pouvait prendre toutes les valeurs énergétiquement possibles, les fréquences émises correspondraient à un spectre d'émission continue. Ce n'est pas ce que l'on observe.

II.2 Spectre d'émission de l'atome d'hydrogène

a) Obtention du spectre

Pour obtenir le spectre, on utilise un tube à décharge constitué d'un tube de verre, de faible diamètre, muni à ses extrémités de deux électrodes métalliques. Il contient du dihydrogène sous faible pression (environ 1,5 mbar).



ne tension croissante est appliquée entre les électrodes : quand elle atteint quelques centaines de volts, on observe le passage d'un courant électrique tandis que le tube devient lumineux. Il est parcouru par un courant formé d'électrons et d'ions positifs. Ces particules effectuent des chocs inélastiques contre les molécules du dihydrogène provoquant la dissociation de certains d'entre elles. On obtient ainsi un mélange d'électrons, d'ions, de molécules et d'atomes d'hydrogène. Ceux-ci sont alors excités lors des collisions et émettent en se désexcitant des ondes électromagnétiques.

On observe un spectre d'émission qui n'est pas continu.

Il est constitué d'une **série de raies**. On dit qu'on a un **spectre de raies**. On a donc une quantification de l'énergie des atomes.

b) Relation entre la longueur d'onde et l'énergie de l'onde

Lors de la désexcitation, il y a émission d'une onde électromagnétique d'énergie E .

On peut montrer que cette énergie est directement proportionnelle à la période de l'onde notée T , à la fréquence notée f ou ν par la

relation : $E = h\nu$ on verra dans le cours que $\lambda = cT = \frac{c}{f} = \frac{c}{\nu}$. Soit $E = \frac{hc}{\lambda}$.

L'énergie de l'onde électromagnétique émise vaut : $E = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$
avec $h =$ constante de Planck $= 6,62 \times 10^{-34}$ J.s

c) Classification des spectres

c1) Constante de Rydberg

En 1885, Balmer établit une relation empirique (qui découle de l'expérience) entre les longueurs d'onde des raies spectrales. Il propose la formule : $\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{m^2} \right)$

On définit σ le nombre d'onde : $\sigma = \frac{1}{\lambda}$

R_H est la constante de Rydberg : $R_H = 1,09677 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$ et m un entier > 2 .

- Si $m \leq 6$: on retrouve les 4 radiations observées dans le visible (656, 486, 434 et 410 nm)
- Si $m > 6$: on retrouve les radiations observées dans l'UV.
- Si $m \rightarrow \infty$, on a la raie limite : $\lambda_\infty = 365 \text{ nm}$.

En 1908, Ritz généralisa la formule de Balmer. La formule de Ritz permet d'expliquer toutes les longueurs d'onde observées et même de prévoir d'autres longueurs d'onde découvertes ultérieurement.

Formule de Ritz : $\sigma = \frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)$ avec n, m entiers tels que $m > n$.

Pour chaque valeur de n , on définit une série :

- $n = 1$: série de Lyman (1916) : $m = 2, 3, \dots$ On est dans le domaine de l'UV.
- $n = 2$: série de Balmer (1885) : $m = 3, 4, \dots$: Domaine visible et UV.
- $n = 3$: série de Paschen (1908) : $m = 4, 5, \dots$ Domaine proche IR
- $n = 4$: série de Brackett (1922) : domaine de l'IR
- $n = 5$: série de Pfund (1924) : domaine de l'IR
- ...

On retient le nom des séries : Lyman, Balmer, Paschen, Brackett, Pfund.

II.3 Interprétation des résultats expérimentaux

a) Résultats de Bohr (1913)

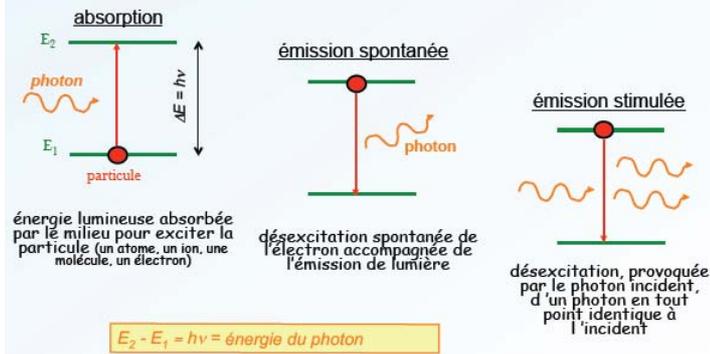
En 1913, Bohr a proposé un modèle classique permettant d'expliquer certains phénomènes observés à l'époque. On dit que c'est un modèle classique puisqu'il utilise la mécanique quantique. On verra que l'atome ne peut s'étudier rigoureusement qu'avec la mécanique quantique. On va d'ailleurs voir dans ce cours la naissance de la mécanique quantique.

Modèle de Bohr :

- L'atome d'hydrogène est constitué d'un noyau, et d'un électron de masse m qui décrit autour du noyau une orbite circulaire uniforme centrée sur le noyau.
- L'électron d'un atome d'hydrogène ne possède qu'un nombre limité d'états, chacun d'énergie invariante et bien déterminée. Ces états sont appelés niveaux d'énergie ou état quantiques.
- L'émission ou l'absorption d'une onde électromagnétique correspond à une transition entre deux états quantiques. La différence des niveaux d'énergie correspond à l'énergie de l'onde électromagnétique : $h\nu = E_2 - E_1$

Interaction matière - lumière

Trois processus principaux :



Nous n'allons pas étudier les conséquences de l'émission stimulée (voir compléments hors programmes sur le laser : Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation = amplification de lumière par émission stimulée)

b) Diagramme énergétique de l'atome d'hydrogène

On considère l'absorption d'une onde électromagnétique où l'énergie de l'atome d'hydrogène passe de E_n à E_m .

D'après la formule de Ritz, on a $\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)$.

L'énergie du photon absorbé est $E = E_m - E_n = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = hcR_H \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)$

L'énergie de l'atome d'hydrogène est définie à une constante additive près puisqu'on a accès expérimentalement qu'aux variations d'énergie.

On se fixe la convention suivante : si $m \rightarrow \infty$, $E_m \rightarrow 0$.

La formule précédente devient : $0 - E_n = hcR_H \left(\frac{1}{n^2} - 0 \right)$, d'où $E_n = \frac{-hcR_H}{n^2}$.

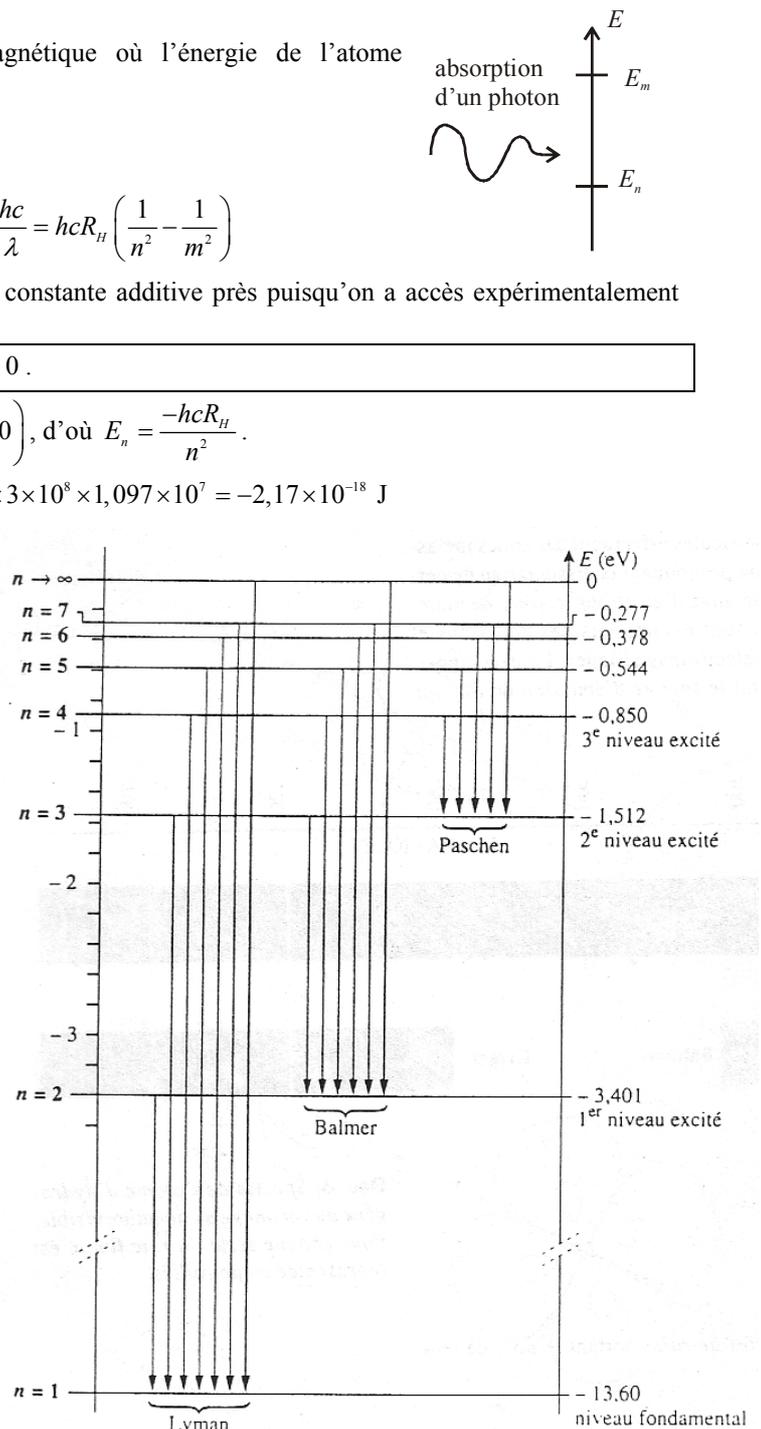
Application numérique : $E_1 = -hcR_H = -6,62 \times 10^{-34} \times 3 \times 10^8 \times 1,097 \times 10^7 = -2,17 \times 10^{-18} \text{ J}$

Or $1 \text{ eV} = 1,6 \times 10^{-19} \text{ J}$. On a donc $E_1 = -13,6 \text{ eV}$.

L'énergie de l'atome d'hydrogène est :

$$E_n = \frac{-13,6}{n^2} \text{ en eV.}$$

Spectre d'émission de l'atome d'hydrogène. On retrouve les séries citées précédemment.



Interprétation :

- Dans son état fondamental, l'énergie de l'atome vaut $-13,6$ eV. L'état fondamental correspond toujours au niveau de plus basse énergie.
- L'atome peut passer dans un état excité. Une onde électromagnétique peut être absorbée si l'énergie de l'onde correspond à la différence des niveaux d'énergie E_n et E_m . L'électron est au niveau 4 par exemple. L'atome est alors dans un état excité. Il peut se désexciter en repassant à un autre niveau excité (3 par exemple) ou revenir au niveau fondamental.
- Que vaut l'énergie d'ionisation de l'atome d'hydrogène ? C'est l'énergie qu'il faut fournir pour arracher un électron quand l'atome est dans son état fondamental. L'électron passe alors du niveau $n = 1$ au niveau $m = \infty$, c'est-à-dire de l'énergie $E_1 = -13,6$ eV à l'énergie $E_{m=\infty} = 0$. Il faut donc fournir à cet atome une énergie de $13,6$ eV. L'énergie d'ionisation de l'atome d'hydrogène vaut donc $13,6$ eV.

Deux méthodes pour calculer la longueur d'onde émise lors du passage du niveau 3 au niveau 2 :

- Application de la formule de Ritz : $\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{3^2} \right)$. L'énoncé doit alors préciser la valeur numérique de la constante de Rydberg qui n'est pas à connaître par cœur.
- Raisonnement physique sur l'émission spontanée. L'énergie de l'onde électromagnétique émise vaut : $E = h\nu = E_3 - E_2 = \frac{hc}{\lambda}$. Les énergies E_2 et E_3 sont calculées avec $E_2 = \frac{-13,6}{2^2}$ eV et $E_3 = \frac{-13,6}{3^2}$ eV.

III. ONDES DE « DE BROGLIE »

III.1 Dualité onde-corpuscule : le photon

La lumière fait partie de l'ensemble du rayonnement électromagnétique (voir polycopié : Compléments sur les ondes électromagnétiques).

- Les phénomènes d'interférences et de diffraction ont permis d'établir le caractère ondulatoire du rayonnement lumineux (description continue de la lumière).
- Cependant, cette description continue de la lumière est incapable d'expliquer certains phénomènes comme l'effet photoélectrique. Ces phénomènes imposent de considérer le **photon comme une particule de masse nulle, d'énergie (on dit aussi de quantum énergétique) égal à $h\nu$, se propageant à la vitesse de la lumière**. On a alors une description discontinue et corpusculaire du rayonnement.

III.2 Relations de « De Broglie »

On a donc deux théories complémentaires :

- Description ondulatoire. Le rayonnement est caractérisé par $\lambda = cT = \frac{c}{f} = \frac{c}{\nu}$. λ désigne la longueur d'onde en m. c la vitesse de la lumière dans le vide = 3×10^8 m.s⁻¹ et $\nu = f$ la fréquence en Hz. L'énergie de l'onde vaut : $E = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$
- Description quantique ou corpusculaire : Le photon est caractérisé par sa quantité de mouvement. Il peut être étudié dans le cadre de la relativité restreinte (développée par Einstein en 1905). On appelle p sa quantité de mouvement. On peut montrer que l'énergie du photon vaut : $E = pc$. La relation la plus générale est $E^2 = (pc)^2 + (mc^2)^2$. mc^2 est la formule bien connue d'Einstein et représente l'énergie au repos. Ici l'énergie au repos est nulle puisque la masse du photon est nulle.

Les deux aspects sont complémentaires. On a deux expressions égales de l'énergie. D'où $E = \frac{hc}{\lambda} = pc$.

On en déduit la formule de De Broglie : $\lambda = \frac{h}{p}$

III.3 Extension aux autres particules

De Broglie (physicien français – prononcer De Breuil) étend à toutes les particules de masses effectivement faibles (neutron, électron, atome...) cette dualité onde-corpuscule établie pour le photon.

Il a obtenu le prix Nobel de physique en 1929.

Pour une particule, on peut définir p sa quantité de mouvement. On a la relation :

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

λ désigne alors la longueur d'onde d'une onde de matière. On peut réaliser actuellement des expériences d'interférences avec des électrons !!!

Si on applique cette relation à des systèmes macroscopiques, on trouve une longueur d'onde tellement petite que l'on ne peut pas mettre en évidence le caractère ondulatoire...

IV. DESCRIPTION ONDULATOIRE D'UNE PARTICULE LIÉE

IV.1 Principe d'incertitude de Heisenberg (1927)

Le principe d'incertitude est une conséquence de la dualité onde-corpuscule.

Principe d'Heisenberg : Il est impossible de déterminer simultanément la position et la quantité de mouvement d'un corpuscule avec autant de précision qu'on le désire.

La détermination simultanée de la position de la particule (x) et de sa quantité de mouvement p_x se fait avec une incertitude Δx sur la position et Δp_x sur la quantité de mouvement.

$$\Delta x \cdot \Delta p_x = \hbar$$

h = constante de Planck = $6,62 \times 10^{-34}$ J.s.

$\hbar = \frac{h}{2\pi}$ = constante de Planck réduite.

Cette limitation n'est pas due à la précision des instruments de physique mais intrinsèque à la mécanique quantique. On va voir les conséquences de cette limitation.

On ne peut donc pas appliquer la mécanique classique à l'infiniment petit (électron...). La notion de trajectoire n'a donc pas de sens en mécanique quantique.

IV.2 La fonction d'onde

En mécanique quantique, on décrit un électron se trouvant au point M de coordonnées (x, y, z) à l'instant t par une fonction d'onde $\Psi(x, y, z, t)$.

La fonction d'onde est solution de l'équation de Schrödinger qui est l'analogue au PFD en mécanique classique. C'est cette équation (hors programme) qui régit l'évolution de la particule en mouvement. Beaucoup de systèmes sont indépendants du temps. On s'intéressa par la suite qu'aux fonctions d'onde $\Psi(x, y, z)$.

Le système à un électron possède une symétrie sphérique. On utilisera les coordonnées sphériques et $\Psi(r, \theta, \varphi)$.

La fonction d'onde est une fonction mathématique qui peut être positive, négative ou complexe.

$|\Psi|^2$ a une signification physique : $d^3P = |\Psi|^2 d\tau$ = probabilité de présence de l'électron dans le volume $d\tau$.

En coordonnées sphériques, on a $d\tau = (dr)(rd\theta)(r \sin \theta d\varphi)$

Si on intègre sur tout l'espace, on est sûr de trouver l'électron ! La probabilité vaut 1.

$$\text{Condition de normalisation : } \iiint_{\text{espace}} |\Psi|^2 d\tau = 1$$

1^{ère} conclusion : En mécanique quantique, la notion de trajectoire n'existe plus. Elle est remplacée par une probabilité de présence de l'électron dans un volume donné.

2^{ème} conclusion : Toute l'information sur l'électron est contenue dans la fonction d'onde. L'équation de Schrödinger admet des solutions dont certaines sont physiquement inacceptables. Des impératifs physiques font apparaître trois nombre quantiques.

IV.3 Trois nombres quantiques

a) Nombre quantique principal

- Le nombre quantique principal n est un entier strictement positif.
- Il détermine la couche à laquelle l'électron appartient :
 - $n = 1$ couche K
 - $n = 2$ couche L
 - $n = 3$ couche M
 - $n = 4$ couche N
- Il définit l'énergie de l'atome hydrogénoïde : $E_n = \frac{-13,6 Z^2}{n^2}$ en eV.

b) Nombre quantique secondaire

- Le nombre quantique secondaire l est un entier tel que : $0 \leq l \leq n-1$. Pour n fixé, l peut prendre n valeurs.
- Pour n fixé, il définit la sous-couche¹ :
 - $l = 0$ sous-couche s
 - $l = 1$ sous couche p
 - $l = 2$ sous couche d
 - $l = 3$ sous couche f
- l est lié à la quantification du module du moment cinétique orbital : $\vec{\sigma}_o = \overline{OM} \wedge m\vec{v}$ et $\|\vec{\sigma}_o\|^2 = l(l+1)\hbar^2$

c) Nombre quantique magnétique

- Le nombre quantique magnétique m_l est un entier tel que : $-l \leq m_l \leq l$. Pour l fixé, m_l peut prendre $(2l+1)$ valeurs.
- m_l est lié à la quantification de la projection du moment cinétique orbital suivant Oz : $\sigma_z = m_l \hbar$

d) Conséquences pour l'état de l'atome

Le triplet $\{n, l, m_l\}$ définit un état quantique du système.

Le nombre de triplets qui ont le même nombre quantique n est égal à n^2 : $\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = 2 \frac{n(n-1)}{2} + n = n^2$.

Exemple pour l'atome d'hydrogène avec $n = 2$. On a quatre états quantiques qui ont la même énergie : $E_2 = \frac{-13,6}{2^2}$ en eV. Les états avec $n = 2$ sont : $\{2, 1, 0\}$, $\{2, 1, -1\}$, $\{2, 1, 1\}$ et $\{2, 0, 0\}$.

On dit que ces quatre états sont dégénérés puisqu'ils ont la même énergie.

À chaque état quantique pour un électron de l'atome d'hydrogène correspond une seule fonction d'onde.

Pour $n = 2$, on a donc 4 états quantiques et donc 4 fonctions d'onde : $\psi_{2,1,0}(r, \theta, \varphi)$, $\psi_{2,1,-1}(r, \theta, \varphi)$, $\psi_{2,1,1}(r, \theta, \varphi)$ et $\psi_{2,0,0}(r, \theta, \varphi)$.

V. LES ORBITALES ATOMIQUES

V.1 Définition

On appelle orbitale atomique (OA) d'un atome hydrogénoïde une fonction d'onde qui permet de calculer la densité de probabilité de présence de l'électron.

n définit une couche

n, l définit une sous-couche

n, l, m_l définit une orbitale atomique

V.2 Nom des orbitales atomiques

Chaque orbitale atomique a un nom qui fait intervenir les nombres quantiques et les éléments de symétrie.

- $n = 1, l = 1$ et $m_l = 0$. On a une seule OA : $\boxed{1s}$
- $n = 2$
 - Si $l = 0$: OA : $\boxed{2s}$

¹ s : sharp, p : principal, d : diffuse, f : fundamental

Si $l = 1, -1$ ou 0 . On a trois OA : $2p_x, 2p_y, 2p_z$

On ne retient pas que p_x correspond à $l = 1$, p_y correspond à $l = -1 \dots$

- $n = 3$

Si $l = 0$: OA : $3s$

Si $l = 1, -1$ ou 0 . On a trois OA : $3p_x, 3p_y, 3p_z$

Si $l = 2$. On a cinq OA : $3d_{z^2}, 3d_{x^2-y^2}, 3d_{xy}, 3d_{yz}, 3d_{xz}$

V.3 Compléments HORS PROGRAMME pour l'ion hydrogénéoïde

On a vu que la probabilité de présence d'un électron dans un volume est $d^3P = |\Psi|^2 (dr)(rd\theta)(r \sin \theta d\varphi)$. La fonction d'onde peut se mettre sous la forme : $\Psi_{n,l,m_l}(r, \theta, \varphi) = R(r) \cdot Y(\theta, \varphi)$

Expression mathématiques des OA :

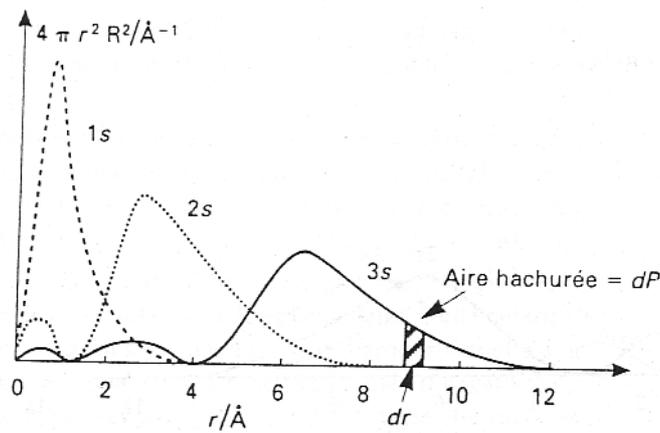
n	l	m _l	O. A.	Partie radiale R(r)	Partie angulaire Y(θ, φ)	Énergie en eV
1	0	0	1s	$2 \left[\frac{Z}{a_0} \right]^{3/2} \exp\left(\frac{-Zr}{a_0}\right)$	$\frac{1}{2\sqrt{\pi}}$	-13,6 Z ²
2	0	0	2s	$\frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{Z}{a_0} \right]^{3/2} \left(1 - \frac{Zr}{2a_0}\right) \exp\left(\frac{-Zr}{2a_0}\right)$	$\frac{1}{2\sqrt{\pi}}$	-3,4 Z ²
2	1	0	2p _z	$\frac{1}{2\sqrt{6}} \left[\frac{Z}{a_0} \right]^{3/2} \frac{Zr}{a_0} \exp\left(\frac{-Zr}{2a_0}\right)$	$\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \cos \theta$	
2	1	1	2p _x		$\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \sin \theta \cos \varphi$	
2	1	-1	2p _y		$\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \sin \theta \sin \varphi$	
3	0	0	3s	$\frac{2}{9\sqrt{3}} \left[\frac{Z}{a_0} \right]^{3/2} \left(3 - 2\frac{Zr}{a_0} + \frac{2}{9}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2\right) \exp\left(\frac{-Zr}{3a_0}\right)$	$\frac{1}{2\sqrt{\pi}}$	-1,51Z ²
3	1	0	3p _z	$\frac{4}{27\sqrt{6}} \left[\frac{Z}{a_0} \right]^{5/2} r \left(2 - \frac{Zr}{3a_0}\right) \exp\left(\frac{-Zr}{3a_0}\right)$	$\frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \cos \theta$	
3	1	1	3p _x		$\frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \sin \theta \cos \varphi$	
3	1	-1	3p _y		$\frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \sin \theta \sin \varphi$	
3	2	0	3d _{z²}	$\frac{4}{81\sqrt{30}} \left[\frac{Z}{a_0} \right]^{3/2} \left[\frac{Zr}{a_0} \right]^2 \exp\left(\frac{-Zr}{3a_0}\right)$	$\frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1)$	
3	2	1	3d _{xz}		$\frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{\pi}} \sin 2\theta \cos \varphi$	
3	2	-1	3d _{yz}		$\frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{\pi}} \sin 2\theta \sin \varphi$	
3	2	2	3d _{x²-y²}		$\frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{\pi}} \sin^2 \theta \cos 2\varphi$	
3	2	-2	3d _{xy}		$\frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{\pi}} \sin^2 \theta \sin 2\varphi$	

a_0 est le rayon de Bohr : $a_0 = \frac{\epsilon_0 h^2}{\pi m_e e^2} = 52,9 \text{ pm}$

On peut séparer en deux probabilités : probabilité radiale $dP(r) = R^2(r)r^2 dr$ et probabilité angulaire $dP(\theta, \varphi) = Y^2(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta d\varphi$.

On peut représenter graphiquement $R^2(r)4\pi r^2 dr$ la probabilité de présence radiale de l'électron entre deux sphères de rayons r et $r+dr$. On constate qu'un électron dans un OA 3s est statistiquement plus éloigné du noyau qu'un électron dans une OA 1s.

Plus n augmente, plus l'électron est statistiquement éloigné du noyau.

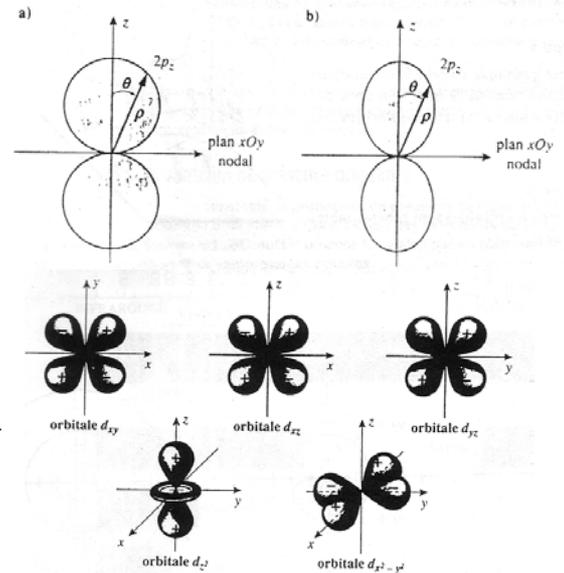


On représente une surface Σ qui visualise les variations de Y en fonction de θ et φ . La longueur ρ est portée le long de la demi-droite Δ , définie par θ et φ , est proportionnelle à θ et $|Y(\theta, \varphi)|^2$.

Les orbitales s ont la symétrie sphérique. $|Y(\theta, \varphi)|^2$ est une constante. On les représente par des sphères centrées sur le noyau.

Les orbitales p sont à symétrie de révolution. Pour $2p_x$ $|Y(\theta, \varphi)|^2$ est maximum le long de l'axe Ox . Pour $2p_y$ $|Y(\theta, \varphi)|^2$ est maximum le long de l'axe Oy . Pour $2p_z$ $|Y(\theta, \varphi)|^2$ est maximum le long de l'axe Oz .

Les orbitales d sont représentées ci-contre. Pour $3d_{xy}$, $3d_{yz}$ et $3d_{xz}$ $|Y(\theta, \varphi)|^2$ est maximum le long des bissectrices des axes, alors que pour $3d_{z^2}$ et $3d_{x^2-y^2}$, $|Y(\theta, \varphi)|^2$ est maximum le long des axes.



VI. LE SPIN DE L'ÉLECTRON

Le dédoublement de certaines raies spectrales lors de l'examen de spectres d'émission effectués en présence d'un champ magnétique extérieur intense (effet Zeeman) conduit à attribuer à l'électron un moment cinétique propre : $\vec{\sigma}_s$ son spin.

Le spin peut être considéré comme le moment cinétique propre $\vec{\sigma}_s$ de l'électron dans le cadre de la mécanique quantique.

On peut donner une image classique : l'électron tourne sur lui-même dans un sens ou dans l'autre sens. Attention, cette image classique est évidemment fautive en mécanique quantique mais elle est tout de même pratique à utiliser.

On définit :

s = nombre quantique de spin ou spin = $\frac{1}{2}$ pour l'électron

m_s = nombre quantique magnétique de spin avec $-s \leq m_s \leq s$. m_s vaut donc $\frac{1}{2}$ ou $-\frac{1}{2}$.

Remarque : on a vu que m_l désigne le nombre quantique magnétique : m_l peut varier entre $-l$ et l par saut de 1. De même m_s peut varier entre $-s$ à s par saut de 1. Par contre m_s ne prend que des valeurs demi-entières pour l'électron.

On a vu que : $\|\vec{\sigma}\|^2 = l(l+1)\hbar^2$ et $\sigma_z = m_l \hbar$: c'est la quantification du moment cinétique orbital.

De même, on a quantification du moment cinétique propre : $\|\vec{\sigma}_s\|^2 = s(s+1)\hbar^2$ et $\sigma_{sz} = m_s \hbar$.

L'électron dans l'atome d'hydrogène est caractérisé par quatre nombre quantiques :

n = nombre quantique principal

l = nombre quantique secondaire

m_l = nombre quantique magnétique

m_s = nombre quantique magnétique de spin (vaut $\frac{1}{2}$ ou $-\frac{1}{2}$).