

DEPARTEMENT D'ENSEIGNEMENT

ECA

ELECTRONIQUE - ELECTROTECHNIQUE - AUTOMATIQUE



HLEE404

Physique ondulatoire

Introduction à la physique quantique

Stéphane Blin

Maître de Conférences

Institut d'Électronique et des Systèmes

UMR CNRS 5214

St Priest - Bât. 5 - Bureau 0/146

Stephane.Blin@umontpellier.fr





Organisation du cours

Plan du cours

Avant-propos

A. Dualité onde-corpuscule

B. Équation de Schrödinger pour la particule libre

C. Diffusion par un potentiel dans l'espace

D. Orbitales atomiques

Conseil quant à la méthodologie de travail :

- ⌚ Votre **présence** en cours est largement recommandée
- ⌚ Ce cours demande tout particulièrement un **travail continu**
- ⌚ Je vous conseille grandement une **prise de note** indépendante des transparents





Avant-propos

- Les composants électroniques
- Le transistor MOSFET

A. Dualité onde-corpuscule

B. Équation de Schrödinger pour la particule libre

C. Diffusion par un potentiel dans l'espace

D. Orbitales atomiques





Composants électroniques intégrés

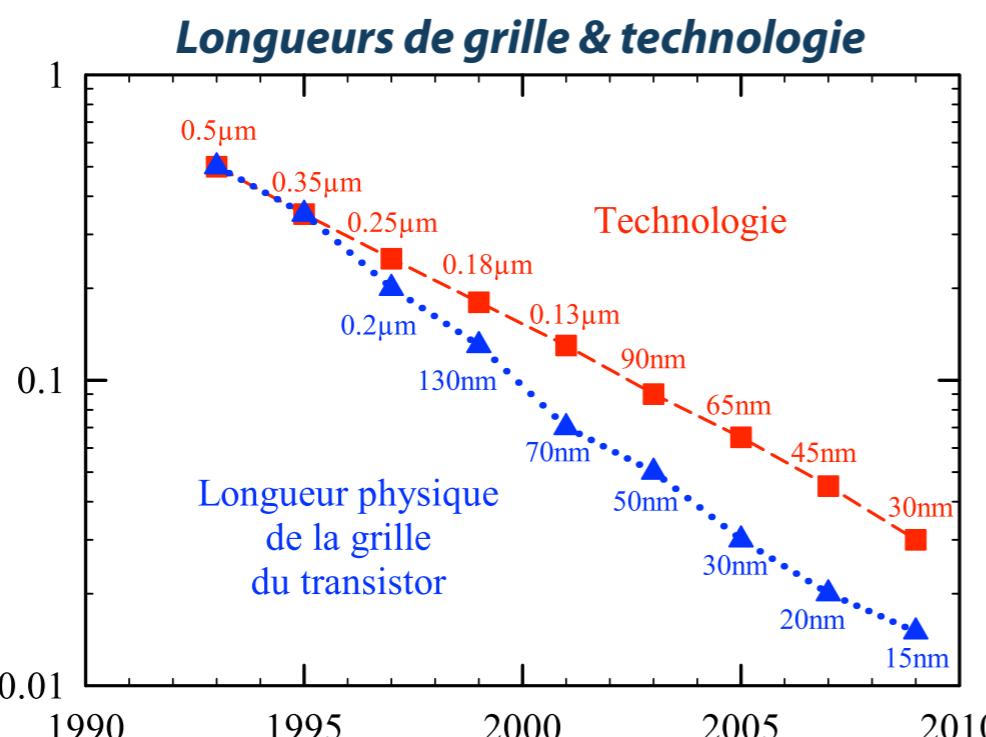
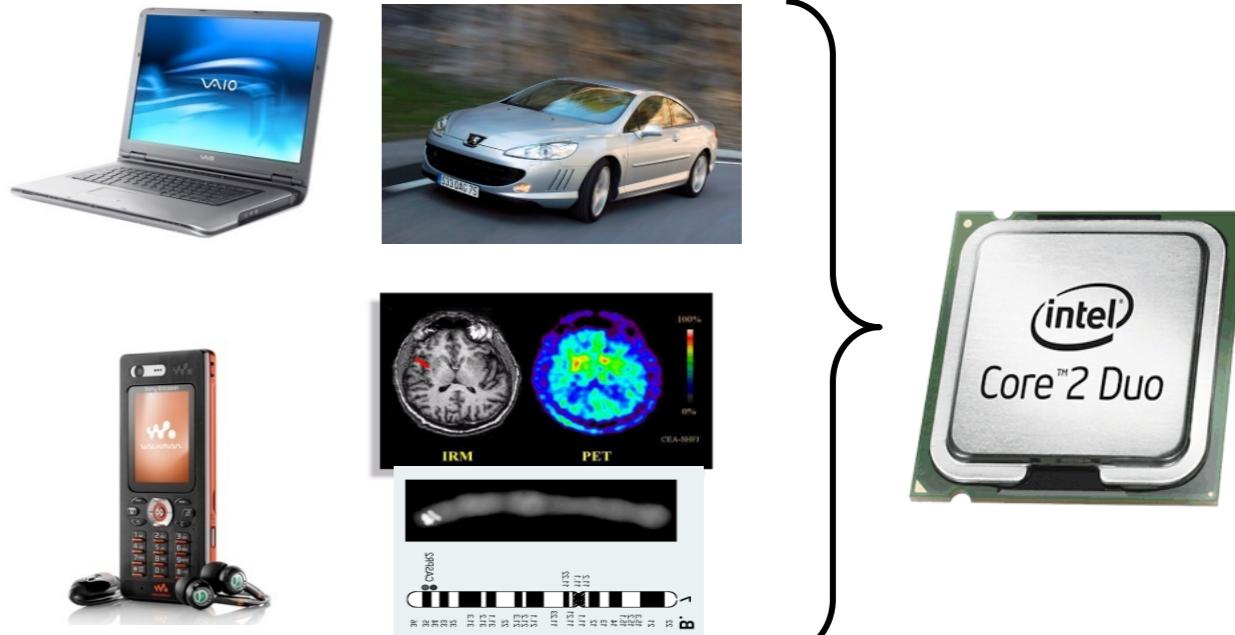
Électronique intégrée

- Temps de bascule de l'inverseur MOS :

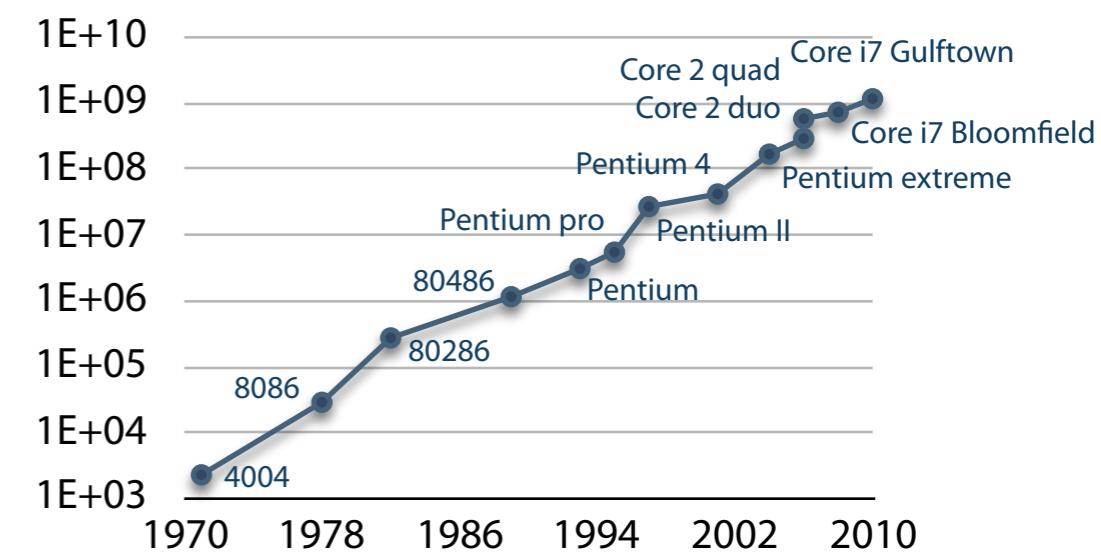
$$\tau = C V_{DD} / I$$

- Intérêt de la miniaturisation

- Diminuer les capacités
- Augmenter la vitesse
- Augmenter l'intégration
- Réduire la consommation



Nombre de transistors par processeur grand public



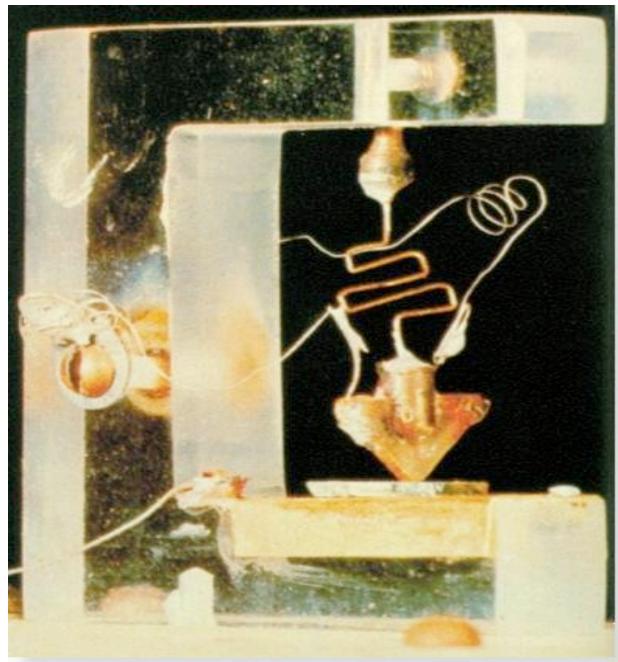
Le transistor MOSFET



1930

Newton,
Maxwell,
etc.

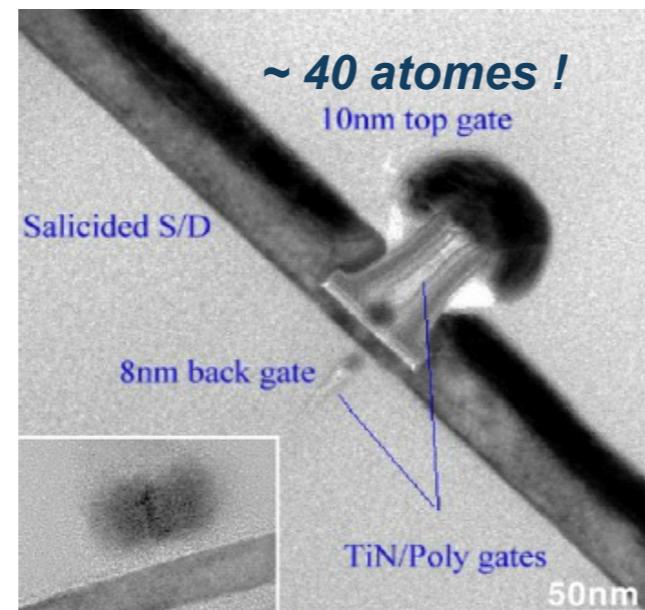
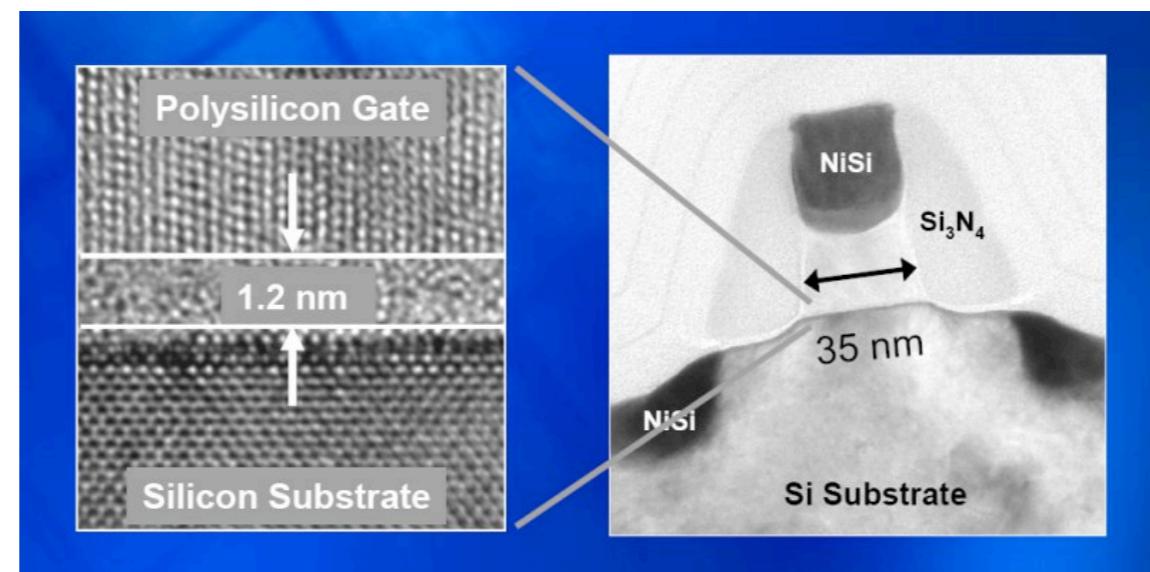
Lilienfeld
brevet du
transistor à SC



Bell Labs, 1947

1947

Bardeen, Brattain et Schokley
1^{er} transistor (bipolaire)
Prix nobel en 1956



1961

1^{er} circuit intégré
planaire

1966

1^{er} transistor
MOS

2007

Développement de
l'industrie du
semi-conducteur

INTEL 65 nm
P4, CoreDuo
Commercial

Transistor Double-Grille CEA- LETI
 $L \approx 10 \text{ nm}$ (2005)
Recherche

Aux dimensions actuelles
la mécanique quantique est indispensable
à la compréhension du transistor
et autres composants (opto-)électroniques





Avant-propos

A. Dualité onde-corpuscule

1. Physique classique au XIX^e siècle
2. Vers la mécanique quantique
3. Dualité onde-corpuscule

B. Équation de Schrödinger

C. Diffusion par un potentiel dans l'espace

D. Orbitales atomiques





1. Physique classique au XIX^e siècle

a) Mécanique classique

Description des phénomènes sous un aspect corpusculaire ou ondulatoire

💡 La mécanique de Newton : une description corpusculaire

Considérons un électron de masse m et de charge q_1 se déplaçant avec une vitesse v au voisinage d'une charge q_2

- **Force** dominante au niveau atomique :

Force électrique F_e

$$\vec{F}_e = \frac{1}{4\pi\epsilon} \frac{q_1 q_2}{r^2} \vec{n} = q_1 \vec{E} = -q_1 \text{grad } V$$

force conservative

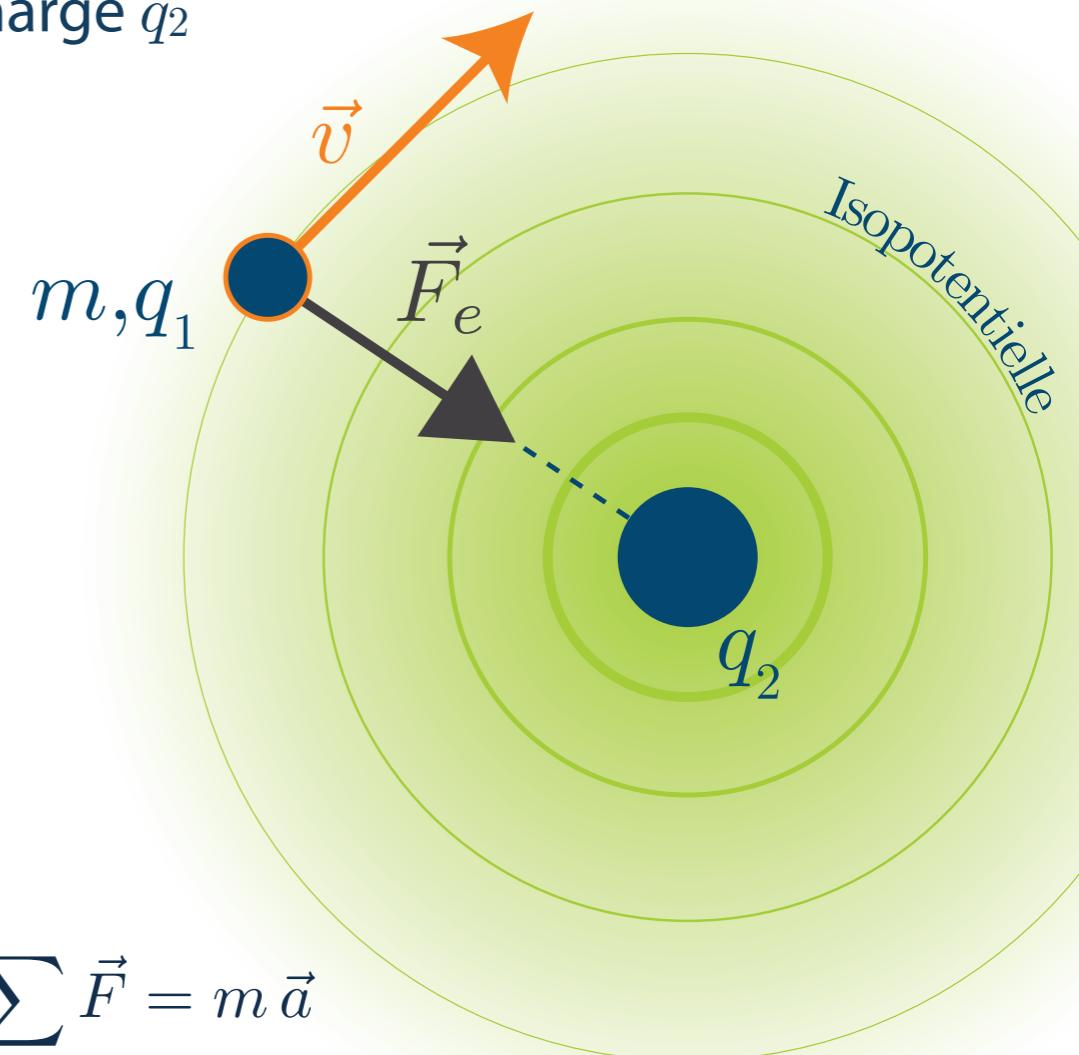
- **Énergie** de l'électron :

Énergie cinétique E_c et énergie potentielle E_p :

$$E_c = \frac{1}{2} m v^2 \quad \text{et} \quad E_p = q_1 V$$

- **Dynamique** de l'électron :

relation fondamentale de la dynamique :



$$\sum \vec{F} = m \vec{a}$$





1. Physique classique au XIX^e siècle

b) Phénomènes ondulatoires

Considérons une onde électromagnétique se propageant dans le vide selon la direction x



- **Équation de propagation** (équation d'onde) issue des équations de Maxwell :

$$\vec{\Delta} \vec{E} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = \vec{0}$$

où c est la vitesse de la lumière dans le vide

- **Solution monochromatique sous forme d'onde plane** (une des solutions possibles) :

Champ électrique → $E = E_0 \cos \left(\frac{2\pi}{\lambda} x \pm \frac{2\pi}{T} t + \varphi \right)$

Amplitude →

Périodicité spatiale :
longueur d'onde λ

Phase à l'origine →

Périodicité temporelle :
période T ou fréquence $f=1/T$

Sens de propagation :
onde progressive (-) ou régressive (+)





1. Physique classique au XIX^e siècle

- **Équation de dispersion :**

Constante de propagation $k = 2 \pi / \lambda$

Pulsion $\omega = 2 \pi / T$



Relation de dispersion
(lien espace-temps)

$$w = k c$$

- **Notation usuelle sous forme complexe :**

dans un milieu sans perte de propagation :

$$E = E_0 e^{i(kx \pm \omega t + \varphi)}$$

dans un milieu avec pertes de propagation linéaires α :

$$E = E_0 e^{-\alpha x} e^{i(kx \pm \omega t + \varphi)}$$

Module :
amplitude

Terme de phase :
propagation

Mesure usuelle : intensité

Nous observons généralement l'intensité optique I (W/m²) proportionnelle au carré du module du champ :

$$I = \frac{n}{2 Z_0} |E|^2 \propto |E|^2 = |E_0|^2$$

avec l'impédance du vide $Z_0 = \sqrt{\epsilon_0 / \mu_0} = 120 \pi$

*pour une onde progressive ou régressive se propageant dans un milieu sans pertes d'indice n ,
l'intensité est donc constante à la fois dans le temps et dans l'espace*



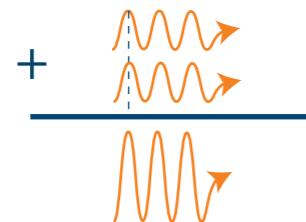


1. Physique classique au XIX^e siècle

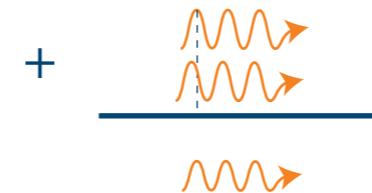
- **Phénomènes d'interférences :**

Phénomène résultant de la superposition de plusieurs ondes de même nature

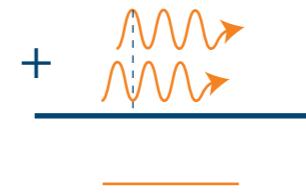
Interférences constructives :
ondes incidentes en phase



Cas intermédiaire :



Interférences destructives :
ondes incidentes en opposition de phase



Linéarité des équations de Maxwell :

L'amplitude de l'onde résultante est la **somme des amplitudes** des ondes en interaction (ceci n'est pas valable pour l'intensité)

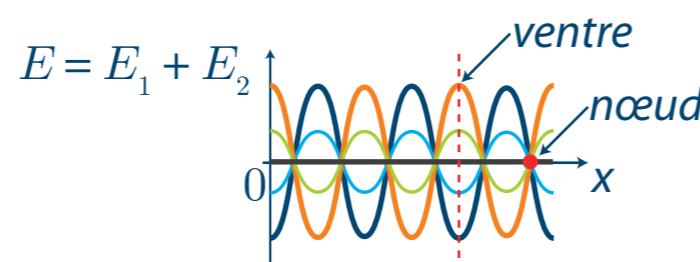
$$\boxed{E = E_1 + E_2}$$

$$I \neq I_1 + I_2$$

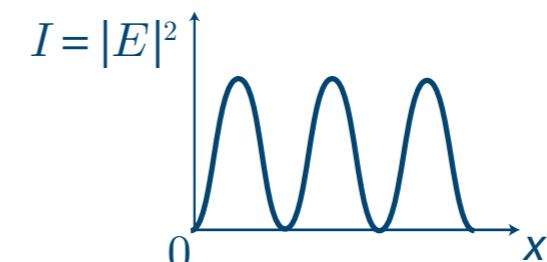
Onde stationnaire :

Les phénomènes d'interférences peuvent amener à l'obtention d'une onde résultante dite **stationnaire** ne se propageant pas dans l'espace, typiquement pour 2 ondes contra-propagatives

Champ résultant
à différents instants



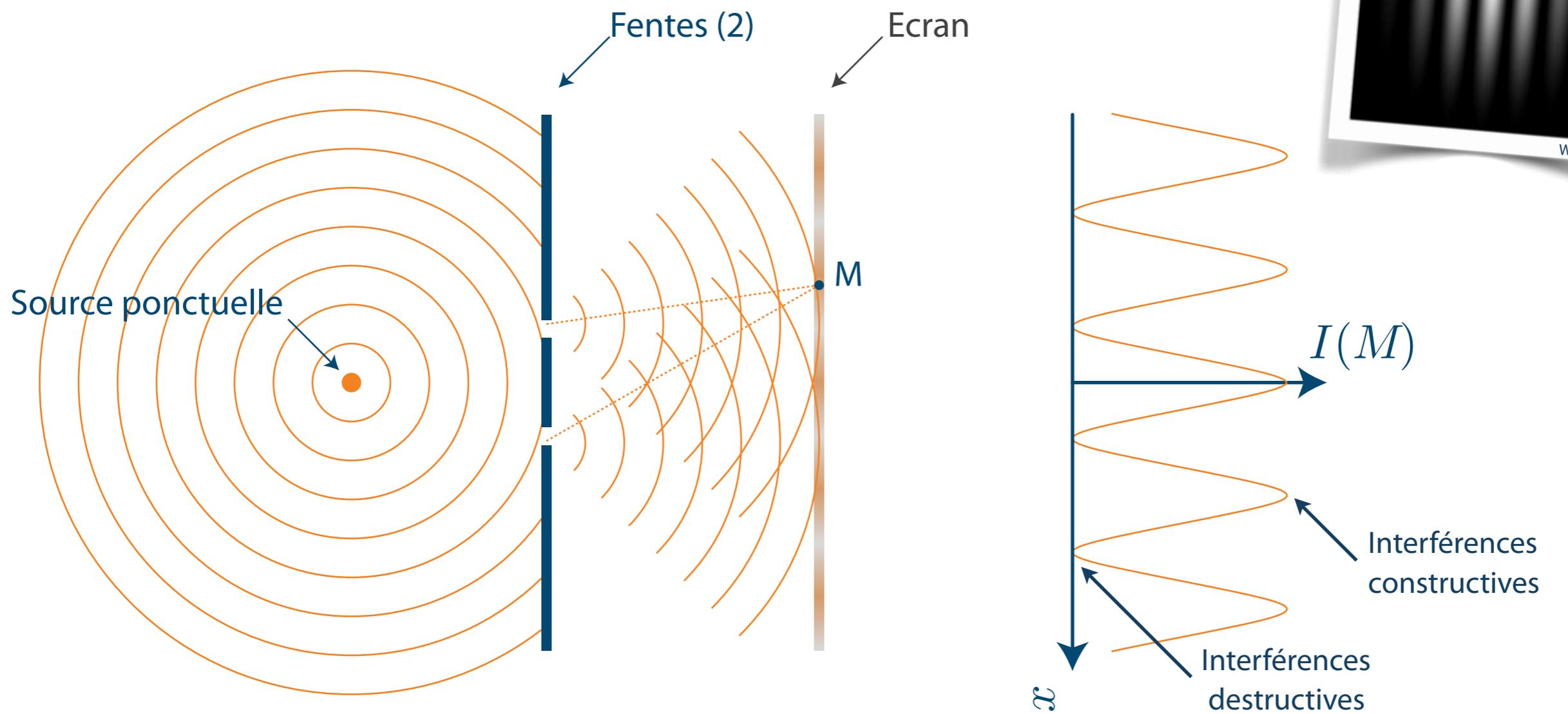
Intensité résultante :





1. Physique classique au XIX^e siècle

*Exemples d'interférences :
les fentes d'Young*





1. Physique classique au XIX^e siècle

c) Synthèse

💡 **À la fin du XIX^e siècle** il est clairement établi que :

- **Les électrons sont des corpuscules**
dont le comportement est régi par la mécanique Newtonienne
 q, m, v & *relation fondamentale de la dynamique*
- **La lumière est une onde**
dont le comportement est régi par les équations de Maxwell
 k, ω, n & Équation d'onde

💡 **Description cependant insuffisante** pour décrire plusieurs observations :

- Catastrophe ultraviolette
- Effet photoélectrique
- Spectre d'émission discrets des atomes

→ **La compréhension de ces phénomènes inexplicables va conduire à la naissance de la mécanique quantique...**





2. Vers la mécanique quantique

a) Loi du corps noir & catastrophe ultraviolette

Spectre du rayonnement émis par un corps noir de température T

📍 **Formule de Rayleigh-Jeans** (fin du XIX) :

Luminance spectrale énergétique L :

$$L = 2 k_B c T / \lambda^4$$

- Bon accord pour les grandes longueurs d'ondes
- Divergence avec l'expérience dans l'ultraviolet...

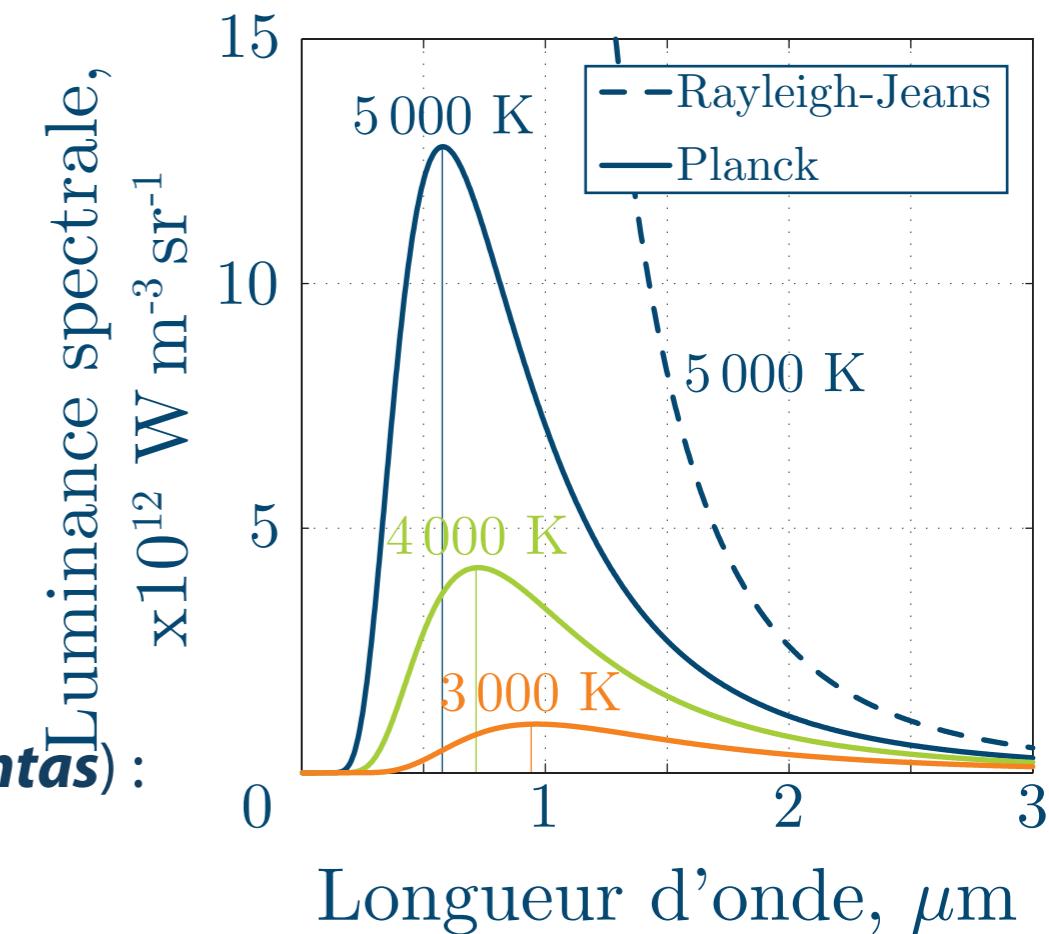
📍 **Loi de Planck** (1900) :

- Planck propose une solution **mathématique** en divisant l'énergie E en quantités élémentaires (**quanta**) :

$$dE = n h \nu \text{ où } n \text{ est un entier}$$

- Loi de Planck :

$$L = \frac{2 h c^2}{\lambda^5} \frac{1}{\exp\left(\frac{h c}{k \lambda T}\right) - 1}$$



Albert Einstein (1905) :

Introduction de la notion de particule (**photon**) d'énergie $E = h \nu$

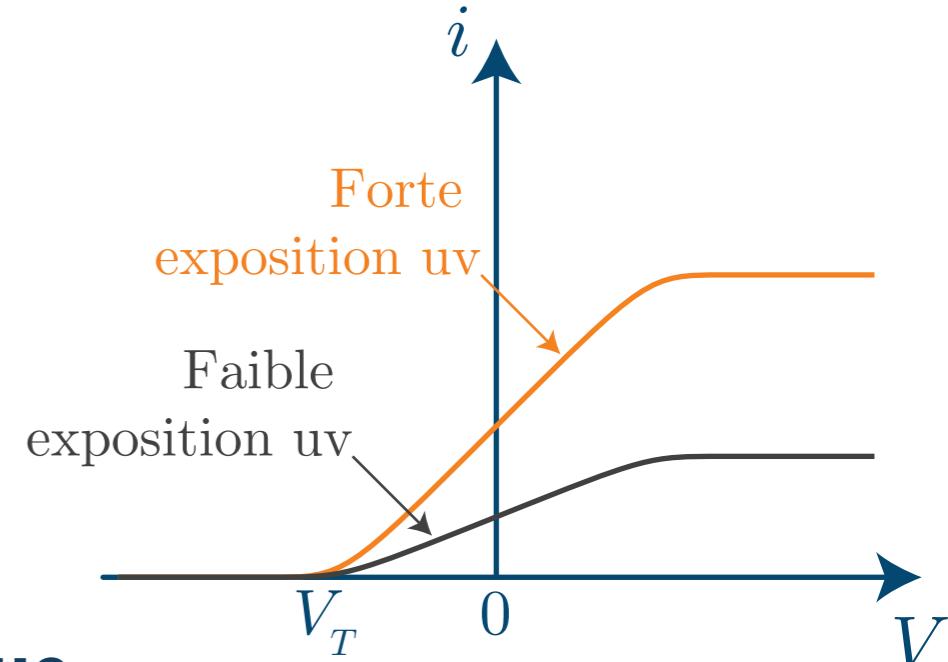
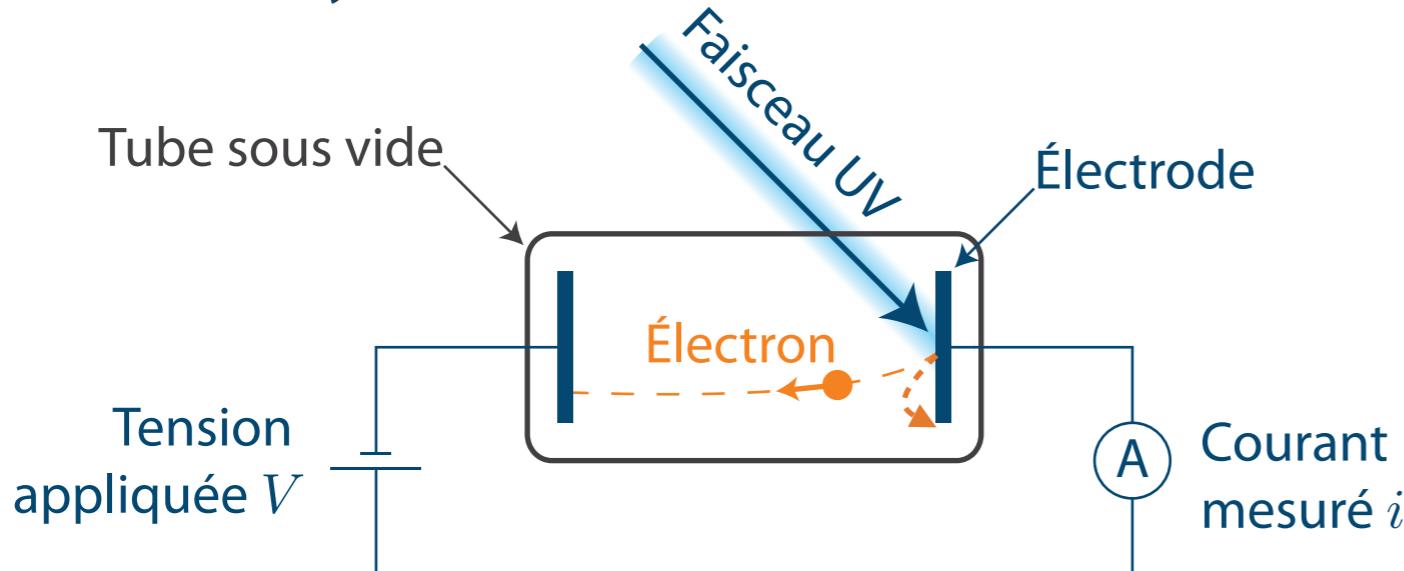




2. Vers la mécanique quantique

b) Effet photoélectrique : historique

- Découverte des effets photovoltaïque et photoélectrique :
Antoine Becquerel (1839) & **Heinrich Rudolf Hertz** (1887)
- Étude systématique par **Philipp Lenard** en 1902 :
Sous un rayonnement uv les électrons sont arrachés de l'électrode et peuvent circuler dans le circuit



Phénomènes inexplicables par la physique classique

- Seuil indépendant de la puissance optique
- Seuil fonction de la fréquence optique :

Expérience de Robert Andrew Millikan (1916)

- dépendance linéaire tel qu'attendu par $E = h\nu$
- mesure de la constante de Planck

Phénomènes expliqués par la mécanique quantique !





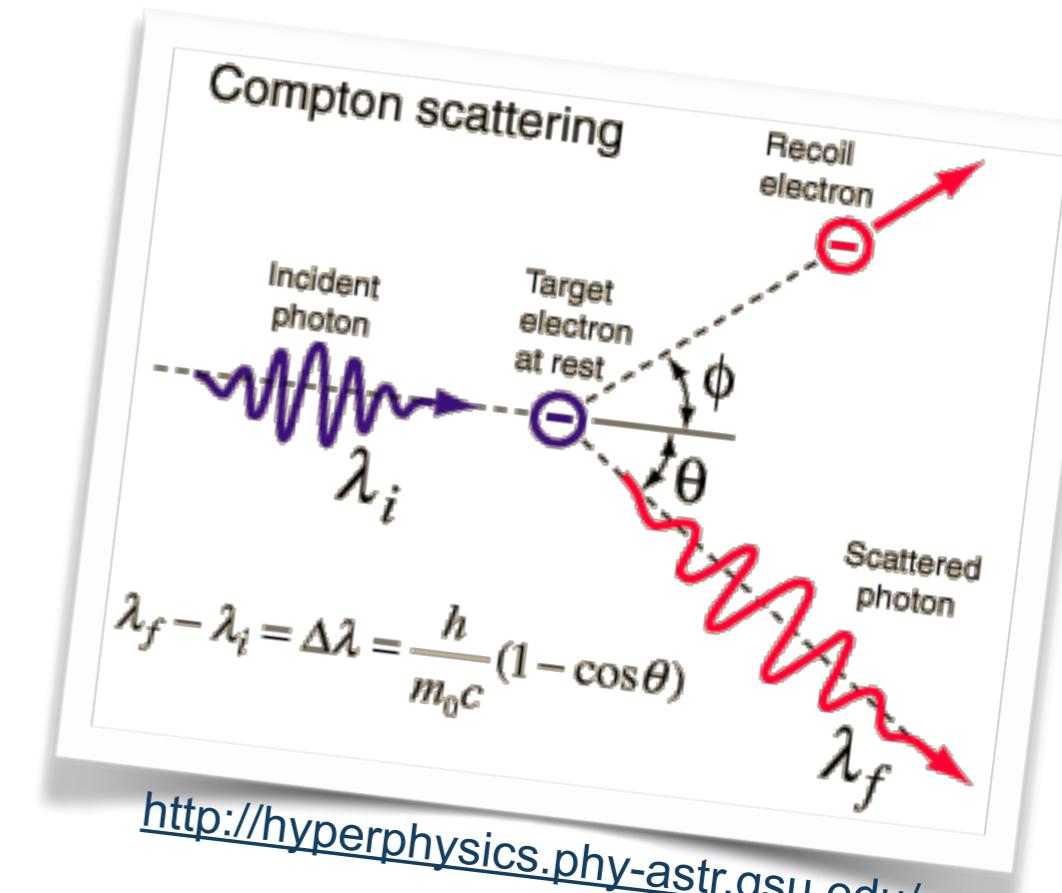
2. Vers la mécanique quantique

c) Effet Compton : comportement du photon comme particule

Expérience de Arthur Compton (1922)

- Diffraction d'un rayonnement X par des électrons d'une cible en carbone :
 - Rayonnement diffracté de longueur d'onde supérieure à la longueur d'onde initiale

- Interprétation :
 - Choc parfaitement élastique (mécanique classique) entre le photon incident et l'électron
 - Perte d'énergie du photon diffracté au profit de l'énergie cinétique de l'électron
 - Diminution de fréquence ($E = h\nu$) donc augmentation de la longueur d'onde



Première observation d'un comportement corpusculaire du photon





3. Dualité onde-corpuscule

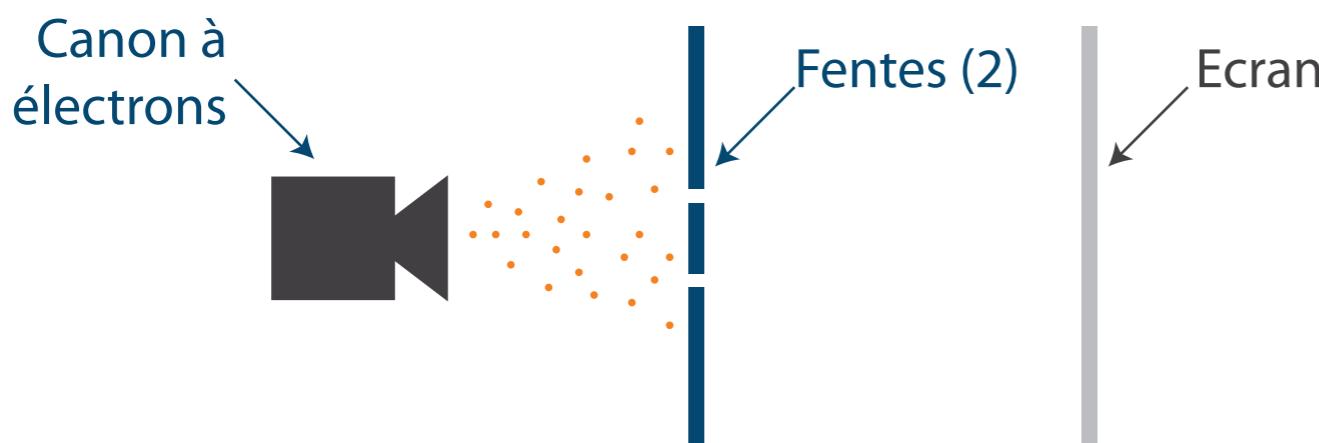
a) Dualité onde-corpuscule :

💡 Lumière :

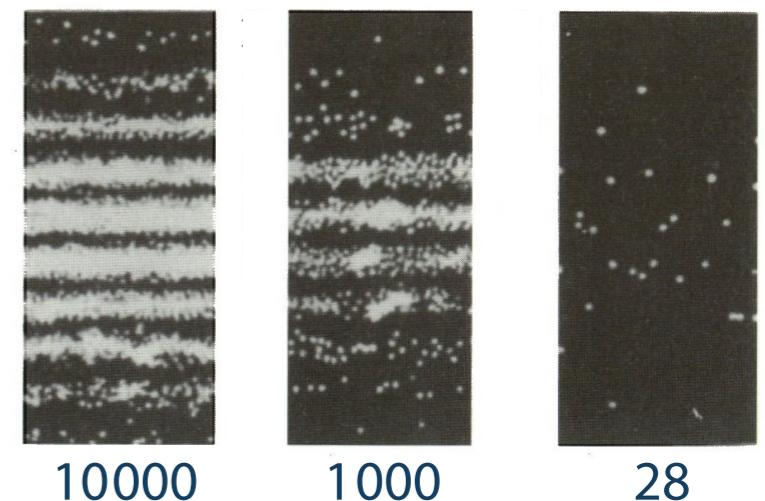
cette dualité onde-corpuscule s'applique à la lumière qui peut se comporter comme un corpuscule (photon) ou une onde

💡 Électrons :

- Les électrons se comportent comme des particules
- Expérience des fentes d'Young pour l'électron :



Observation des impacts électroniques en fonction du nombre d'électrons



→ les électrons se comportent aussi comme des ondes !

Dualité onde-corpuscule pour les électrons comme les photons





3. Dualité onde-corpuscule

b) Longueur d'onde de De Broglie

Longueur d'onde associée à une particule de quantité de mouvement p

- ⌚ Particule d'énergie $E = h \nu$
- ⌚ Longueur d'onde $\lambda = h / p$

Pour une particule relativiste d'énergie $E = m c^2$,
et sachant que $p = m v$,
nous déduisons la seconde relation de la première ?

c) Principe d'incertitude d'Heisenberg

- ⌚ Quelques observations :

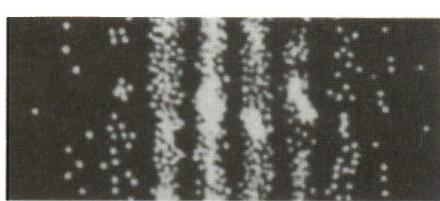
- Particule : position x connue mais longueur d'onde $\lambda (\Rightarrow p)$ inconnue
- Onde : longueur d'onde $\lambda (\Rightarrow p)$ connue mais position x inconnue

⌚ Principe d'Heisenberg : $\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$

- Précisions sur la position Δx et sur la quantité de mouvement Δp ne peuvent être obtenues simultanément



(a) 28 électrons



(b) 1 000 électrons



(c) 10 000 électrons





3. Dualité onde-corpuscule

d) Fonction d'onde

Expression de la fonction d'onde ψ :

- Expression générale de l'amplitude d'une onde plane :

$$\psi(\vec{r}, t) = A \exp \left\{ i \left(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t \right) \right\}$$

- En utilisant les expressions de l'énergie et de la longueur d'onde de De Broglie :

$$\psi(\vec{r}, t) = A \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (\vec{p} \cdot \vec{r} - E t) \right\}$$

Fonction d'onde ψ de la particule

Interprétations physiques :

- Fonction d'onde ψ : amplitude de probabilité de présence
- Module au carré $|\psi|^2$ de la fonction d'onde : densité spatiale de probabilité de présence
 \rightarrow quantité observable, par exemple sur une figure d'interférences
- L'intégrale volumique de la fonction d'onde d'une particule égale donc l'unité





Avant-propos

A. Dualité onde-corpuscule

B. Équation de Schrödinger pour la particule libre

1. Équation de Schrödinger
2. Postulats de la mécanique quantique
3. Solutions stationnaires
4. Opérateurs
5. Conditions aux limites
6. Résolution de problèmes : démarche

C. Diffusion par un potentiel dans l'espace

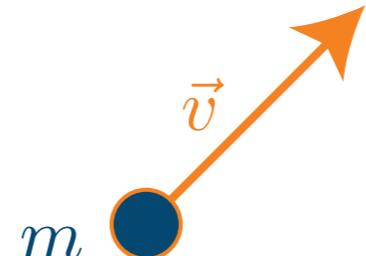
D. Orbitales atomiques





1. Équation de Schrödinger

Équation d'onde pour la particule ?



💡 Considérons une particule libre

- La seule énergie de la particule est l'énergie cinétique soit : $E = E_c = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{p^2}{2m}$
- Expression de la fonction d'onde : $\psi = \psi_0 \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[\vec{p} \cdot \vec{r} - \left(\frac{p^2}{2m} \right) t \right] \right\}$

💡 Équation d'onde...

- Recherchant une équation d'onde, nous calculons pour une seule dimension spatiale :

$$\Delta\psi = \frac{-p^2}{\hbar^2} \psi \quad \text{et} \quad \frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{-i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} \psi$$

- De ces deux relations nous retrouvons l'équivalent d'une équation d'onde pour la particule, équation aussi valable à trois dimensions spatiales :

Équation de Schrödinger pour la particule libre : $i \hbar \frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\psi$





2. Postulats de mécanique quantique

Les deux premiers postulats...

a) Premier postulat :

Il existe une énergie potentielle en mécanique quantique

- Énergie d'une particule en présence d'un potentiel statique : $E = E_c + V(\vec{r})$
- Expression de la fonction d'onde : $\psi = \psi_0 \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[\vec{p} \cdot \vec{r} - \left(\frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) \right) t \right] \right\}$
- Comme précédemment nous pouvons retrouver l'équation de Schrödinger, cette fois pour la particule en présence d'un potentiel statique :

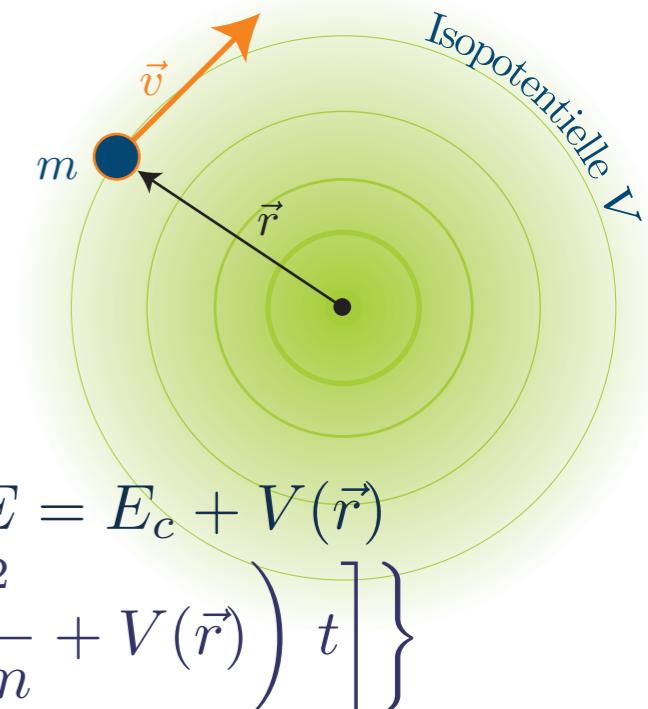
$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right] \psi$$

b) Deuxième postulat :

L'équation de Schrödinger reste identique pour un potentiel non statique

→ ***Équation de Schrödinger d'une particule en présence d'un potentiel non statique :***

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}, t) \right] \psi$$





3. Solutions stationnaires

Recherche de solutions stationnaires

Voir travaux dirigés pour plus de détails...

• Solutions stationnaires ?

- Séparation des variables : $\psi(\vec{r}, t) = \varphi(r) \chi(t)$
- Solution de l'équation de Schrödinger
→ en injectant cette solution dans l'équation de Schrödinger nous obtenons :

$$(1) \quad \chi(t) = A \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} E t \right\} = A \exp \{-i \omega t\} : \text{oscillation temporelle usuelle}$$

$$(2) \quad \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \right] \varphi = E \varphi : \text{équation aux valeurs propres}$$

La résolution de cette équation permet d'obtenir des vecteurs propres φ_i
donc des fonctions d'ondes ψ_i auxquelles sont associés des valeurs propres E_i

Cas particulier :

Une dimension spatiale & potentiel statique :

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)] \varphi(x) = 0$$





4. Opérateurs

Expression générale de l'équation de Schrödinger

- Expression générale de l'équation de Schrödinger :

$$H \psi = i \hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

où H est un opérateur

- Description des opérateurs :

- Fonctions caractéristiques du système et associées à une grandeur mesurable (observable) :
 - Opérateur énergie cinétique $-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta$ associé à E_c
 - Opérateur énergie potentielle V associé à V
 - Opérateur quantité de mouvement $-i \hbar \vec{p}$ associé à p
 - ...
- Linéarité et superposition :
 - Les opérateurs sont linéaires et homogènes





5. Conditions aux limites

💡 Solutions de l'équation de Schrödinger :

- Toute combinaison linéaire de solutions de l'équation de Schrödinger est solution
- Les solutions vérifient deux conditions de continuité :
 - ***La fonction d'onde ψ est continue***
 - ***La dérivée spatiale de la fonction d'onde ψ est continue***
à l'exception des positions où le potentiel V est infini

💡 Démarche générale (simple) pour la résolution d'un problème :

- **Distinguer les différentes régions de l'espace et poser l'équation de Schrödinger**
- **Déterminer la forme des solutions dans ces régions (propagative, évanescante)**
- **Éliminer les solutions non physiques**
- **Appliquer les deux conditions de continuité**
- **Déterminer les constantes et la densité de probabilité de présence $|\psi|^2$**





Avant-propos

A. Dualité onde-corpuscule

B. Équation de Schrödinger

C. Diffusion par un potentiel dans l'espace

1. Puits de potentiel infini
2. Marche de potentiel
3. Barrière de potentiel
4. Puits de potentiel fini

D. Orbitales atomiques





1. Puits de potentiel infini

Puits de potentiel infini

Considérons un puits de potentiel à une dimension : potentiel nul entre $x = 0$ et $x = L$ et infini partout ailleurs

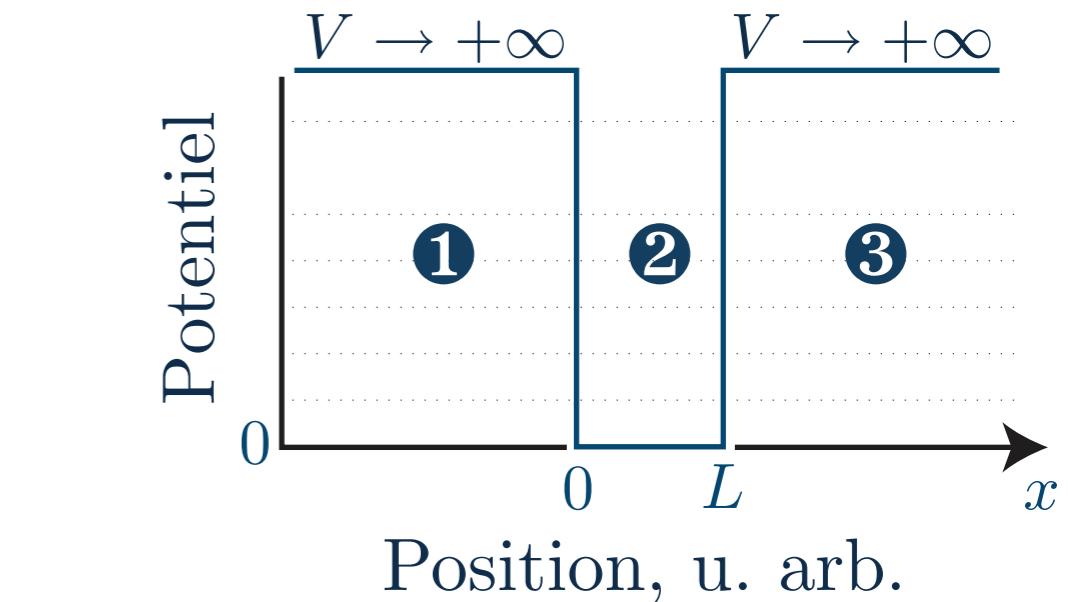
Différentes régions de l'espace :

- Domaine ① :

La particule ne peut exister (potentiel infini) donc $\varphi = 0$

- Domaine ② :

La particule vérifie l'équation de Schrödinger suivante :



$$\varphi'' + \left(2m/\hbar^2\right) E \varphi = 0$$

- Domaine ③ :

La particule ne peut exister (potentiel infini) donc $\varphi = 0$

Forme des solutions :

Nous trouvons donc des solutions de forme : $\varphi = A e^{+i k x} + B e^{-i k x}$

avec $k^2 = 2m E / \hbar^2$





$$\varphi = A e^{+i k x} + B e^{-i k x}$$

1. Puits de potentiel infini

Conditions de continuité :

- À l'interface entre les domaines ① et ② :

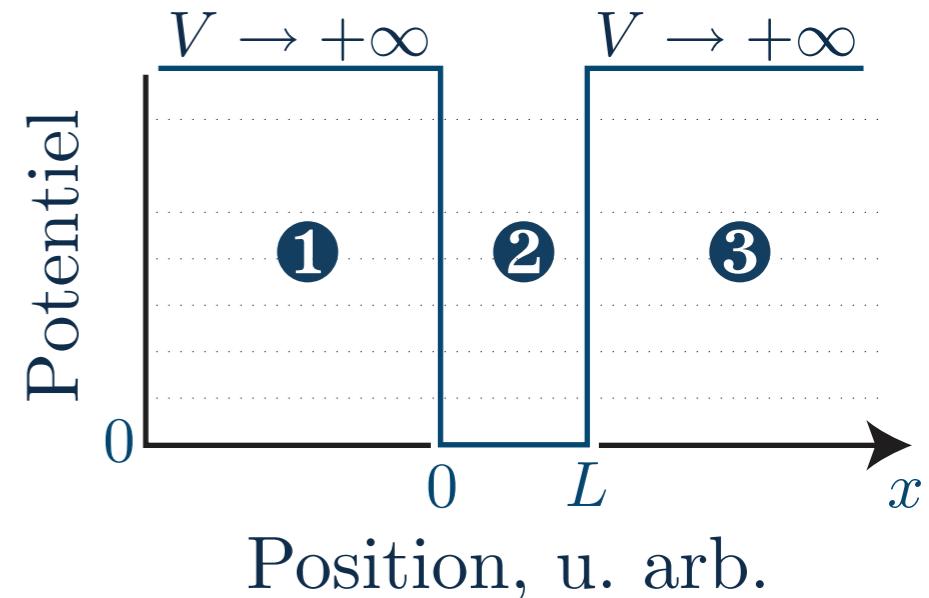
Continuité de la fonction d'onde donc :

$$(1) \quad A + B = 0$$

- À l'interface entre les domaines ② et ③ :

Continuité de la fonction d'onde donc :

$$(2) \quad A \exp(i k L) + B \exp(-i k L) = 0$$



Détermination des constantes :

- De (1) nous déduisons : $\varphi = 2 i A \sin(k x)$
- De (2) nous déduisons $A [\exp(i k L) - \exp(-i k L)] = 0$ soit $A \sin(k L) = 0$

En utilisant l'expression de k nous déduisons :

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi n}{L} \right)^2$$

Quantification des énergies possibles !

Note : cette quantification énergétique due à un puits de potentiel est celle observée pour un électron gravitant autour d'un atome, dans une capacité CMOS, etc.





1. Puits de potentiel infini

📍 Densité de probabilité de présence :

- Densité spatiale de probabilité de présence :

$$|\psi|^2 = |\varphi|^2 = 4 A^2 \sin^2(k_n x)$$

- Normalisation de la probabilité de présence :

$$\int_0^L |\psi|^2 dx = 1 \text{ soit } A = 1/\sqrt(2 L)$$

📍 Fonctions d'ondes :

Quantification des états de la particule

- À chaque état correspond une énergie :

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi n}{L} \right)^2$$

- À chaque état correspond une fonction d'onde :

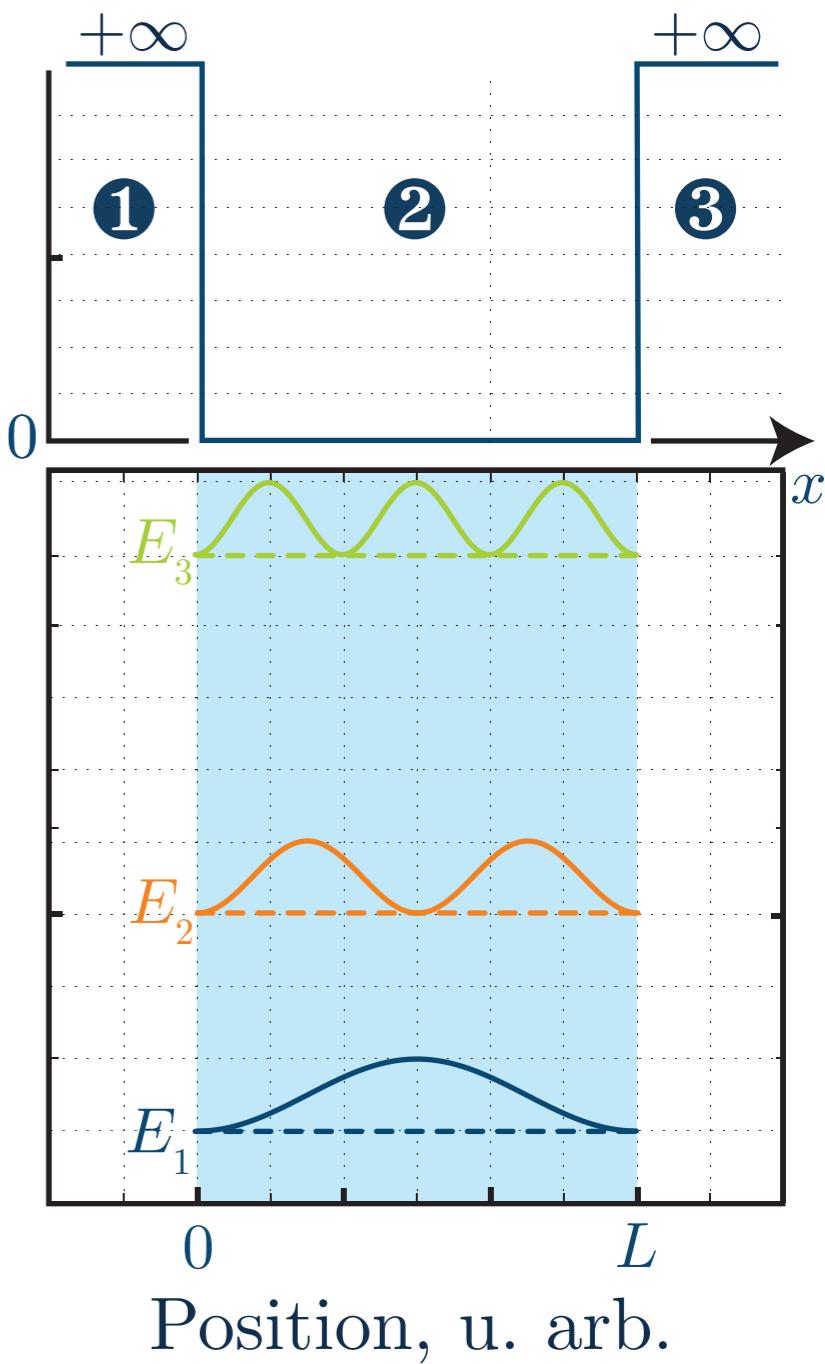
$$\varphi = i \sqrt{2/L} \sin(k_n x)$$

donc une densité de probabilité de présence :

$$|\psi|^2 = (2/L) \sin^2(n \pi x/L)$$



Densité de probabilité de présence et énergies





2. Marche de potentiel

Particule incidente d'énergie inférieure à la marche ($E < V_0$)

Équations de Schrödinger

- Domaine ① : $\varphi'' + (2m/\hbar^2) E \varphi = 0$
 - Domaine ② : $\varphi'' + (2m/\hbar^2) (E - V_0) \varphi = 0$
- On pose : $k_1^2 = 2m E/\hbar^2$ et $k_2^2 = 2m (V_0 - E)/\hbar^2$

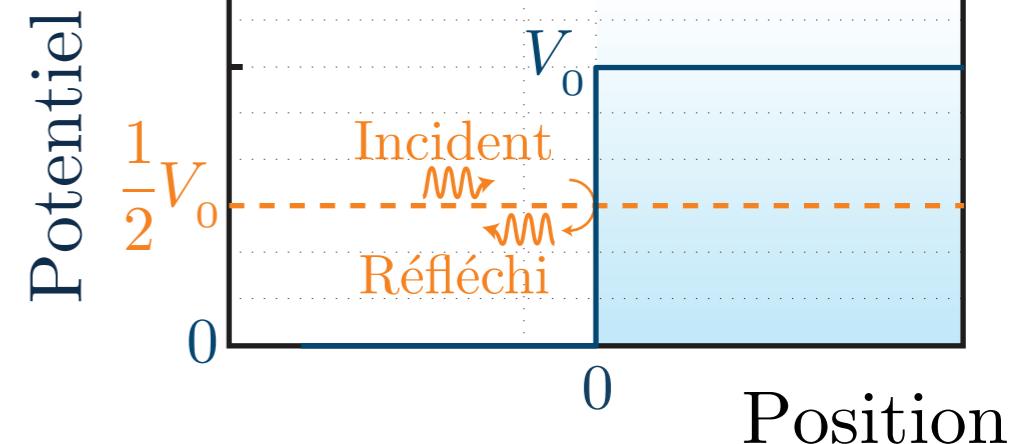
Forme des solutions :

- Domaine ① : $\varphi = A_1 e^{+i k_1 x} + B_1 e^{-i k_1 x}$
Solutions propagatives dans les deux directions
- Domaine ② : $\varphi = \cancel{A_2 e^{+k_2 x}} + B_2 e^{-k_2 x}$
Solutions non propagatives : ondes évanescentes
 L'expression divergente, non physique, est supprimée

Relations de continuité :

Des relations de continuité (φ et sa dérivée), nous pouvons déduire :

$$B_1 = \frac{i k_1 + k_2}{i k_1 - k_2} A_1 \quad \text{et} \quad B_2 = \frac{i 2 k_1}{i k_1 - k_2} A_1$$





2. Marche de potentiel

Particule incidente d'énergie inférieure à la marche ($E < V_0$)

Fonctions d'ondes

- Domaine ① : $\psi = A_1 \{ e^{+i k_1 x} + e^{+i \phi} e^{-i k_1 x} \} e^{-i(E/\hbar)t}$
- Domaine ② : $\psi = A_1 \frac{i 2 k_1}{i k_1 - k_2} e^{-k_2 x} e^{-i(E/\hbar)t}$

Où nous retrouvons l'effet Goos-Hänchen dont le déphasage caractéristique ϕ est tel que :

$$e^{i\phi} = \frac{i k_1 + k_2}{i k_1 - k_2}$$

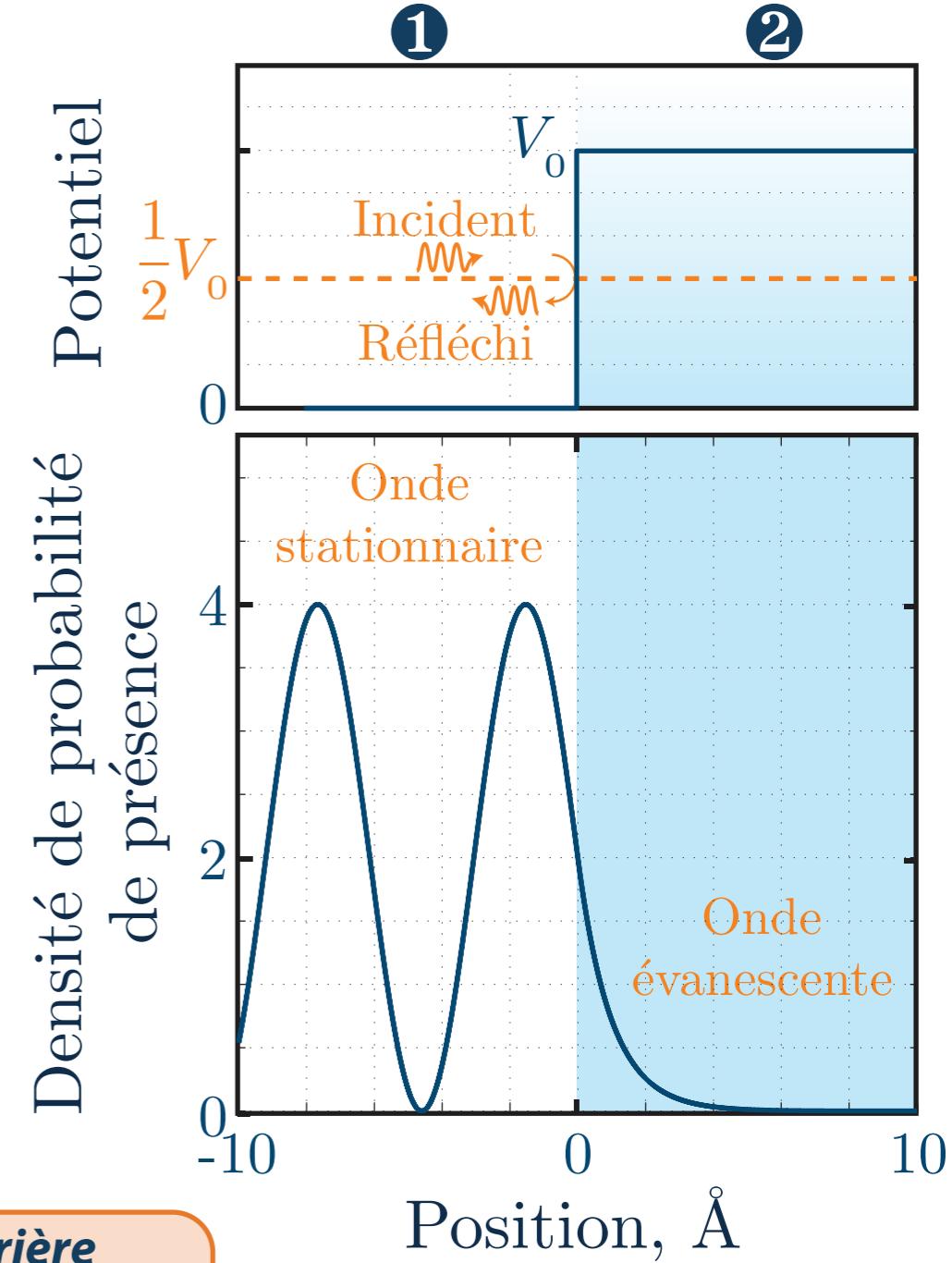
Densités spatiales de probabilité de présence :

- Domaine ① : $|\varphi_1|^2 = 2 A_1^2 \{ 1 + \cos(2 k_1 x - \phi) \}$
- Domaine ② : $|\varphi_2|^2 = 4 A_1^2 \frac{k_1^2}{k_1^2 + k_2^2} e^{-2 k_2 x}$

Probabilité de réflexion totale :

$$R = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2} = \frac{k_1^2 + k_2^2}{k_1^2 + k_2^2} = 1$$

Un électron a une probabilité non nulle d'être présent derrière la marche de potentiel s'il est assez proche (épaisseur de peau)





2. Marche de potentiel

Particule incidente d'énergie supérieure à la marche ($E > V_0$)

Équations de Schrödinger

- Domaine ① : $\varphi'' + (2m/\hbar^2) E \varphi = 0$
 - Domaine ② : $\varphi'' + (2m/\hbar^2) (E - V_0) \varphi = 0$
- On pose : $k_1^2 = 2m E/\hbar^2$ et $k_2^2 = -2m (V_0 - E)/\hbar^2$

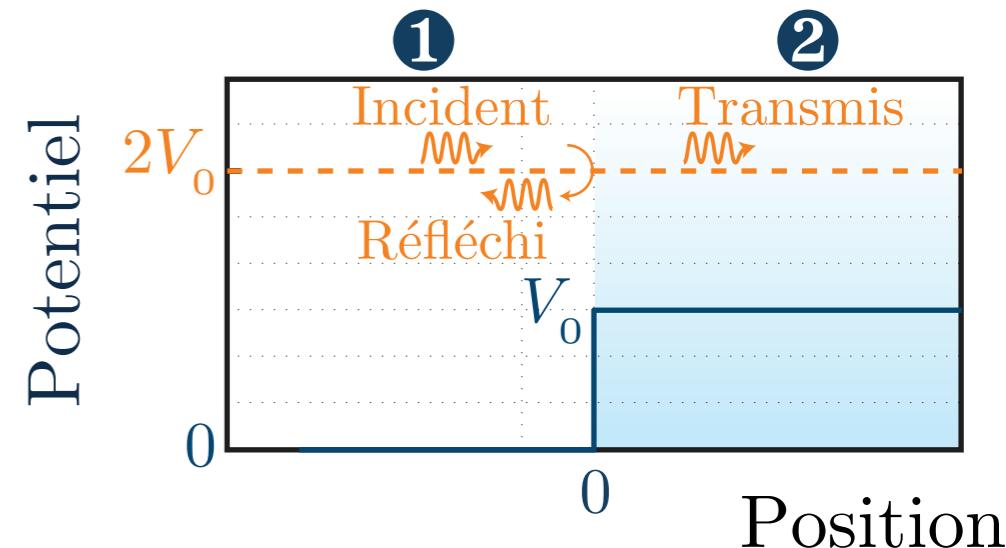
Forme des solutions :

- Domaine ① : $\varphi = A_1 e^{+i k_1 x} + B_1 e^{-i k_1 x}$
Solutions propagatives dans les deux directions
- Domaine ② : $\varphi = A_2 e^{+i k_2 x} + \cancel{B_2 e^{-i k_2 x}}$
Solutions propagatives dans les deux directions
Aucune onde ne pouvant arriver de la droite, $B_2 = 0$

Relations de continuité :

Nous pouvons déduire des relations de continuité :

$$B_1 = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} A_1 \quad \text{et} \quad A_2 = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} A_1$$





2. Marche de potentiel

Particule incidente d'énergie supérieure à la marche ($E > V_0$)

Fonctions d'ondes

- Domaine ① : $\psi = A_1 \left\{ e^{+i k_1 x} + \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} e^{-i k_1 x} \right\} e^{-i(E/\hbar)t}$
- Domaine ② : $\psi = A_1 \frac{2 k_1}{k_1 + k_2} e^{i k_2 x} e^{-i(E/\hbar)t}$

Densités spatiales de probabilité de présence :

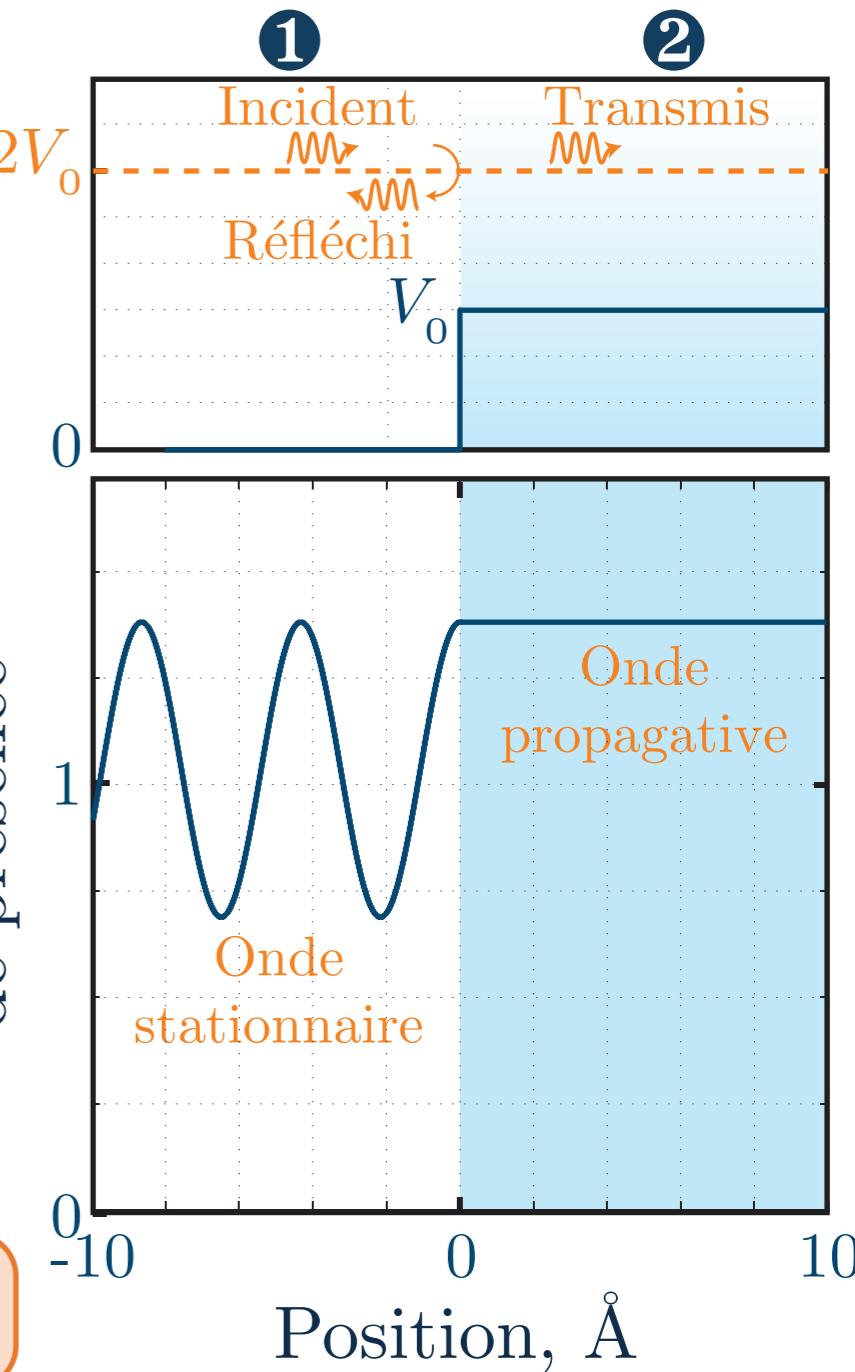
- Domaine ① : $|\varphi_1|^2 = A_1^2 \left\{ 1 + \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2 + 2 \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \cos(2 k_1 x) \right\}$
- Domaine ② : $|\varphi_2|^2 = A_1^2 \frac{4 k_1^2}{(k_1 + k_2)^2}$

Probabilité de réflexion :

$$R = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2} = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2 = \left(\frac{1 - \sqrt{1 - V_0/E}}{1 + \sqrt{1 - V_0/E}} \right)^2$$

Il existe donc une réflexion au niveau de la barrière même pour une particule incidente d'énergie supérieure à la barrière

Potentiel
Densité de probabilité de présence





3. Barrière de potentiel

Particule incidente d'énergie supérieure à la barrière ($E > V_0$)

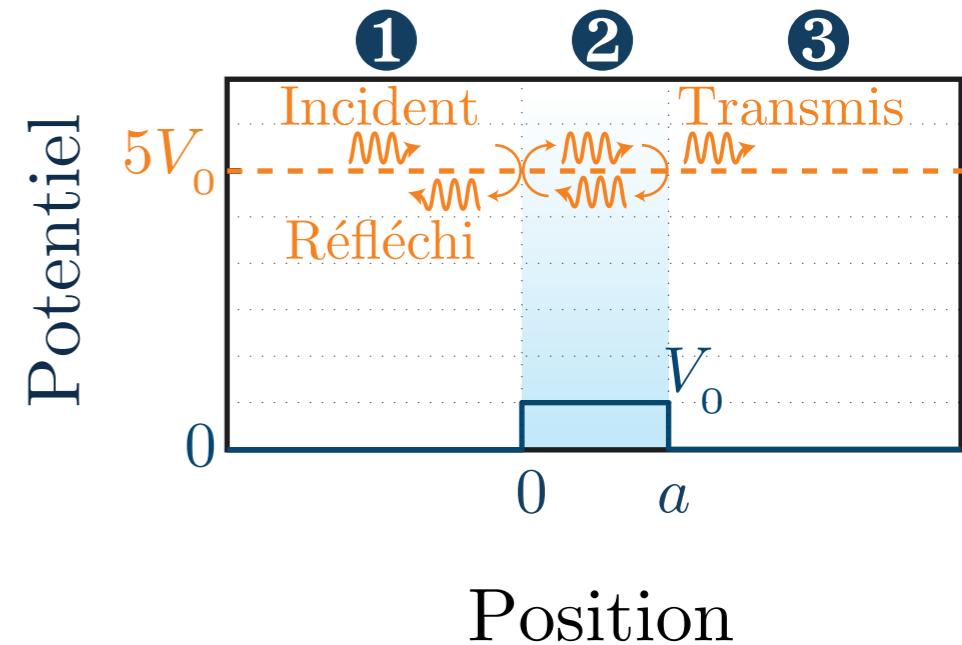
Équations de Schrödinger

- Domaines **1** et **3** : $\varphi'' + (2m/\hbar^2) E \varphi = 0$
- Domaine **2** : $\varphi'' + (2m/\hbar^2) (E - V_0) \varphi = 0$

On pose : $k_1^2 = 2mE/\hbar^2$ et $k_2^2 = 2m(E - V_0)/\hbar^2$

Forme des solutions :

- Domaine **1** : $\varphi = A_1 e^{+i k_1 x} + B_1 e^{-i k_1 x}$
Solutions propagatives dans les deux directions
- Domaine **2** : $\varphi = A_2 e^{+i k_2 x} + B_2 e^{-i k_2 x}$
Solutions propagatives dans les deux directions
- Domaine **3** : $\varphi = A_3 e^{+i k_1 x} + \cancel{B_3 e^{-i k_1 x}}$
Solutions propagatives dans les deux directions
Aucune onde ne pouvant arriver de la droite, $B_3 = 0$





3. Barrière de potentiel

Particule incidente d'énergie supérieure à la barrière ($E > V_0$)

- Relations de continuité :

Nous posons les relations de continuité

*Nous exprimons A_1 et B_1 en fonction de (A_2, B_2)
et exprimons A_2 et B_2 en fonction de A_3*

Nous exprimons tous les coefficients en fonction de A_3

$$A_1 = \left\{ \cos(k_2 a) - i \frac{k_1^2 + k_2^2}{2 k_1 k_2} \sin(k_2 a) \right\} e^{i k_1 a} A_3$$

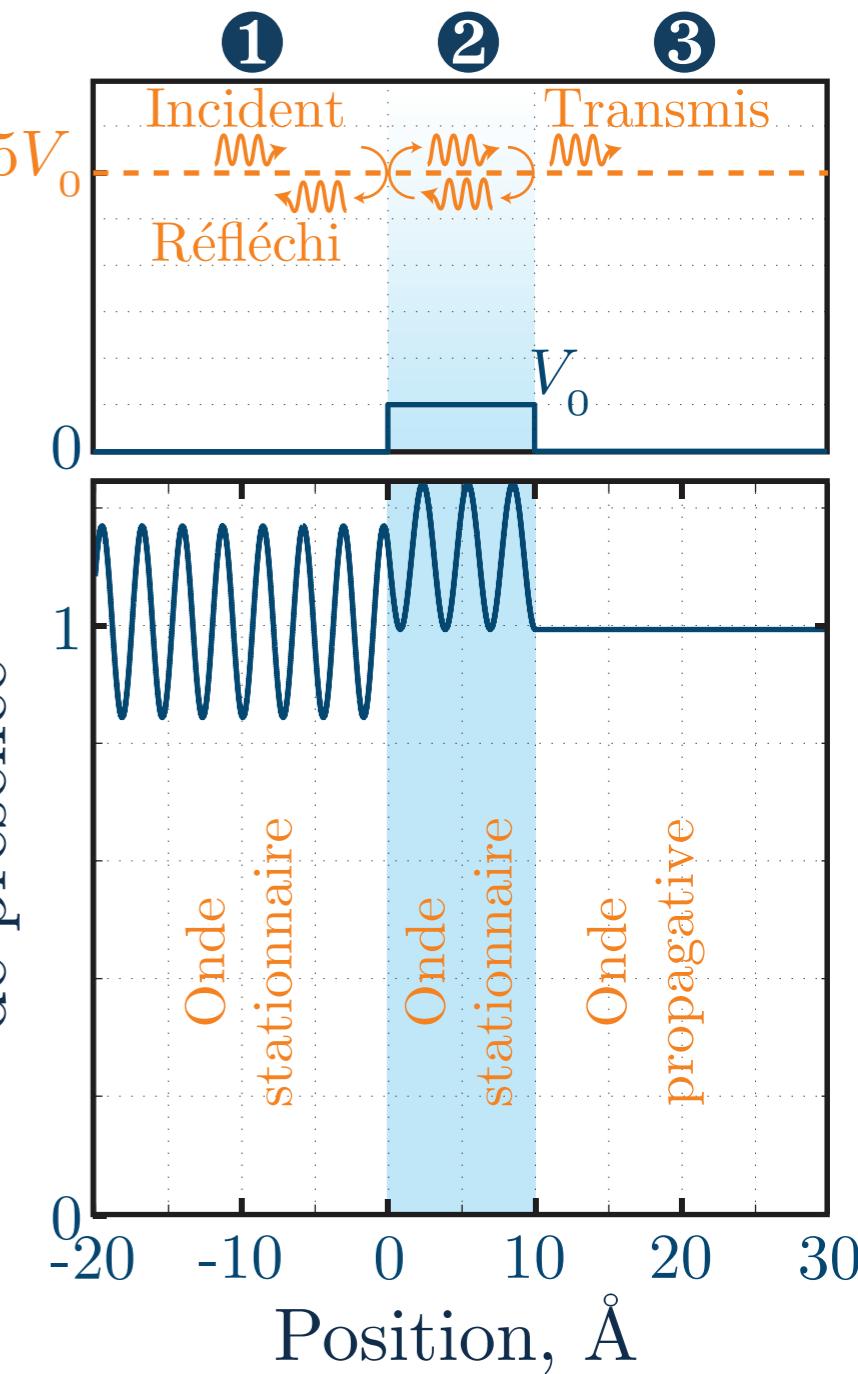
$$B_1 = i \frac{k_2^2 - k_1^2}{2 k_1 k_2} e^{i k_1 a} \sin(k_2 a) A_3$$

$$A_2 = \frac{1}{2 k_2} (k_2 + k_1) e^{i (k_1 - k_2) a} A_3$$

$$B_2 = \frac{1}{2 k_2} (k_2 - k_1) e^{i (k_1 + k_2) a} A_3$$

- Nous pouvons maintenant tracer les densités de probabilité de présence ci-contre

Densité de probabilité de présence





3. Barrière de potentiel

Particule incidente d'énergie supérieure à la barrière ($E > V_0$)

- Probabilité de réflexion au dessus de la barrière :

$$R = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2} = \frac{(k_2^2 - k_1^2)^2 \sin^2(k_2 a)}{4 k_1^2 k_2^2 + (k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2(k_2 a)}$$

soit avec les expressions de k_1 et k_2 :

$$R = \frac{V_0^2 \sin^2 \left(\sqrt{2m(E-V_0)} a / \hbar \right)}{4E(E-V_0) + V_0^2 \sin^2 \left(\sqrt{2m(E-V_0)} a / \hbar \right)}$$

- Transmission au dessus de la barrière :

$$T = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2} = \frac{4(k_1 k_2)^2}{4 k_1^2 k_2^2 \cos^2(k_2 a) + (k_1^2 + k_2^2) \sin^2(k_2 a)}$$

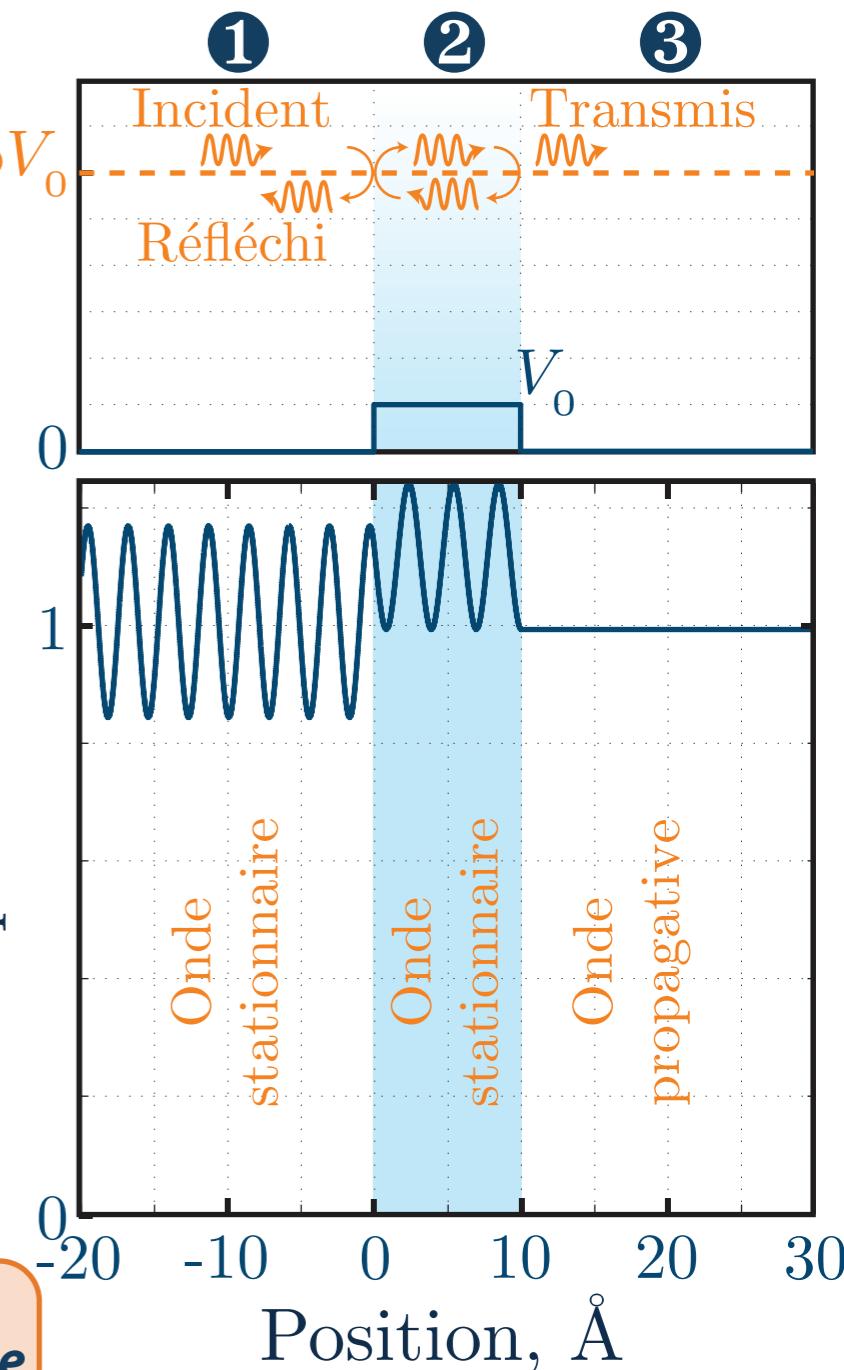
soit avec les expressions de k_1 et k_2 :

$$T = \frac{4E(E-V_0)}{4E(E-V_0) + V_0^2 \sin^2 \left(\sqrt{2m(E-V_0)} a / \hbar \right)}$$

Fabry-Perot ?

Il existe donc une réflexion au niveau de la barrière même pour une particule incidente d'énergie supérieure à la barrière

Potentiel
Densité de probabilité de présence





3. Barrière de potentiel

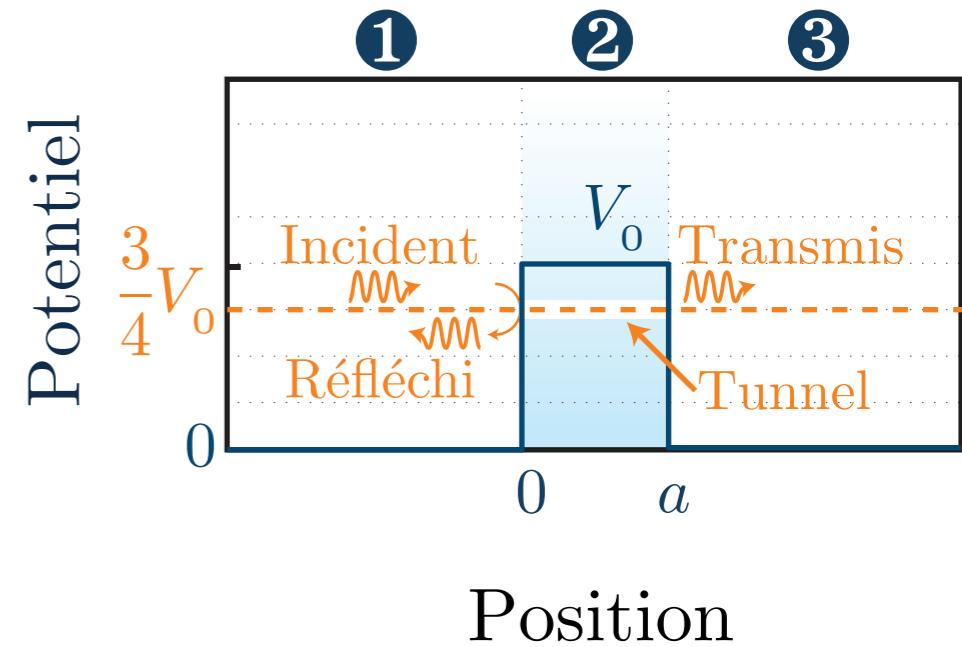
Particule incidente d'énergie inférieure à la barrière ($E < V_0$)

Équations de Schrödinger

- Domaines **1** et **3** : $\varphi'' + (2m/\hbar^2) E \varphi = 0$
 - Domaine **2** : $\varphi'' + (2m/\hbar^2) (E - V_0) \varphi = 0$
- On pose : $k_1^2 = 2mE/\hbar^2$ et $k_2^2 = 2m(V_0 - E)/\hbar^2$

Forme des solutions :

- Domaine **1** : $\varphi = A_1 e^{+i k_1 x} + B_1 e^{-i k_1 x}$
Solutions propagatives dans les deux directions
- Domaine **2** : $\varphi = A_2 e^{+k_2 x} + B_2 e^{-k_2 x}$
Solutions évanescentes
- Domaine **3** : $\varphi = A_3 e^{+i k_1 x} + \cancel{B_3 e^{-i k_1 x}}$
Solutions propagatives dans les deux directions
Aucune onde ne pouvant arriver de la droite, $B_3 = 0$





3. Barrière de potentiel

Particule incidente d'énergie inférieure à la barrière ($E < V_0$)

Relations de continuité :

Nous pouvons déduire des relations de continuité :

$$A_1 = \frac{e^{i k_1 a}}{4 i k_1 k_2} \left\{ (i k_1 + k_2)^2 e^{-k_2 a} - (i k_1 - k_2)^2 e^{+k_2 a} \right\} A_3$$

$$B_1 = \frac{e^{i k_1 a}}{4 i k_1 k_2} \left\{ - (k_1^2 + k_2^2) e^{-k_2 a} + (k_1^2 + k_2^2) e^{+k_2 a} \right\} A_3$$

$$A_2 = \frac{e^{-k_2 a}}{2 k_2} e^{i k_1 a} (k_2 + i k_1) A_3$$

$$B_2 = \frac{e^{+k_2 a}}{2 k_2} e^{i k_1 a} (k_2 - i k_1) A_3$$

Probabilité de transmission par la barrière :

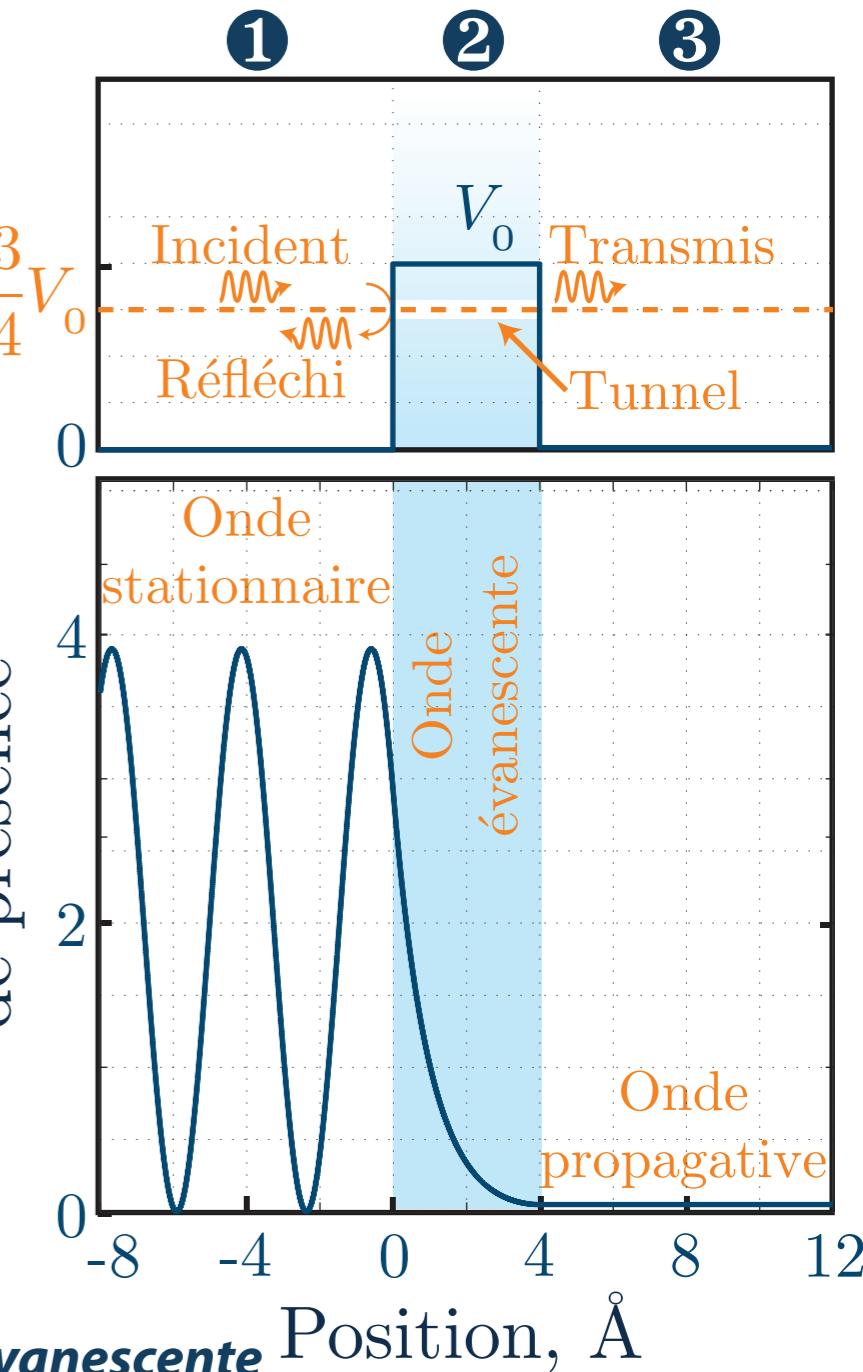
$$T = \frac{4 E (V_0 - E)}{4 E (V_0 - E) + V_0^2 \sinh^2 \left(\sqrt{2 m (V_0 - E)} a / \hbar \right)}$$

• Effet tunnel :

Transmission à travers la barrière non nulle dans le cas d'une particule incidente d'énergie inférieure à la barrière

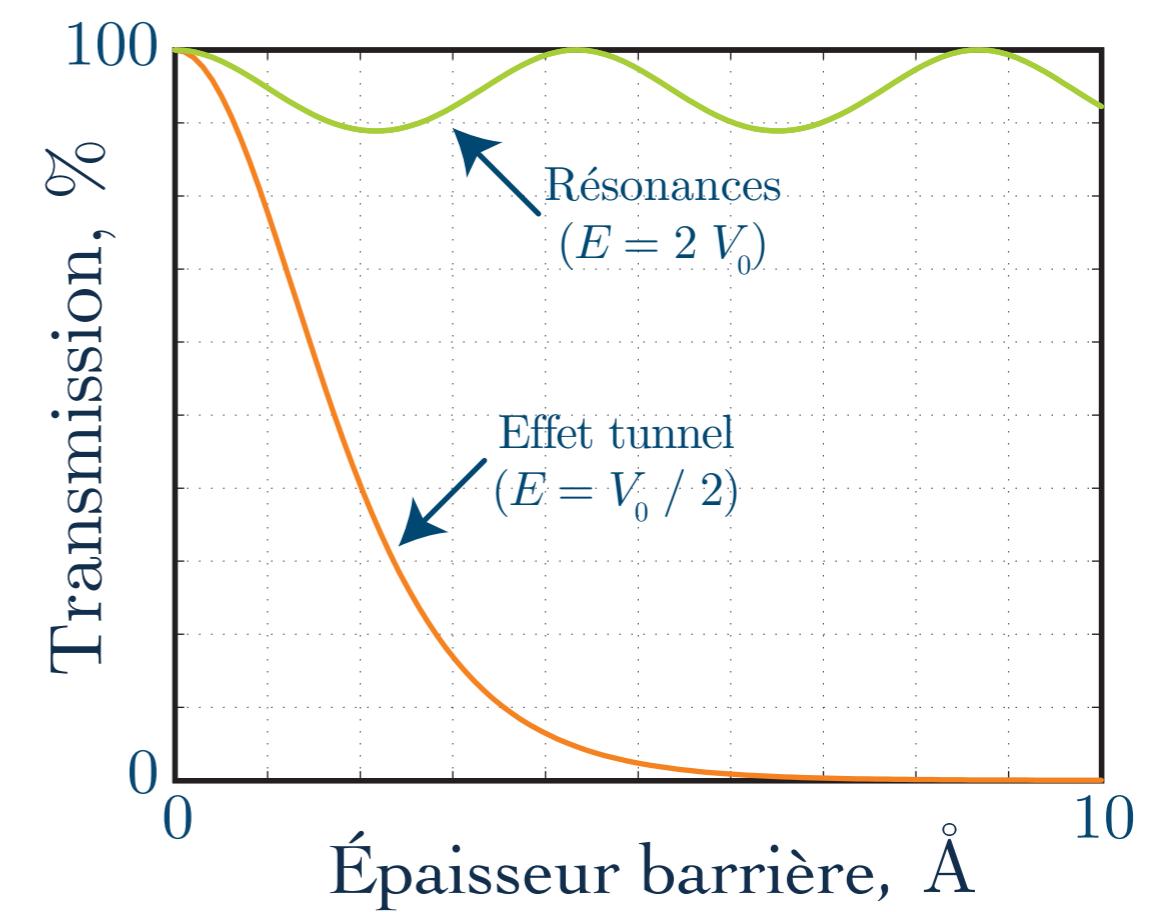
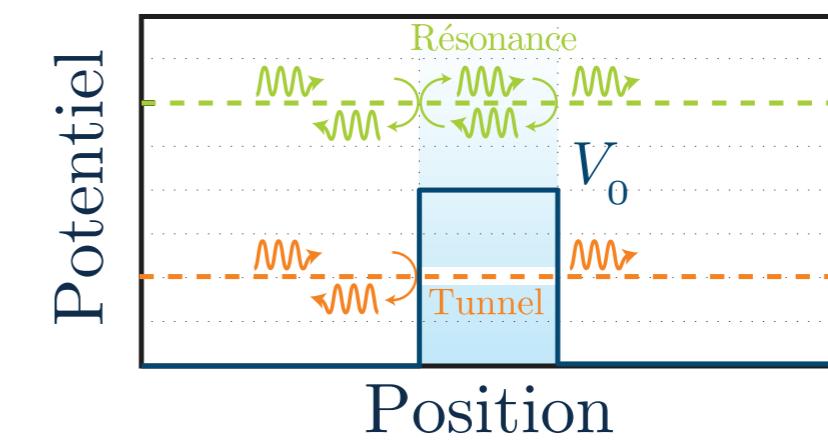
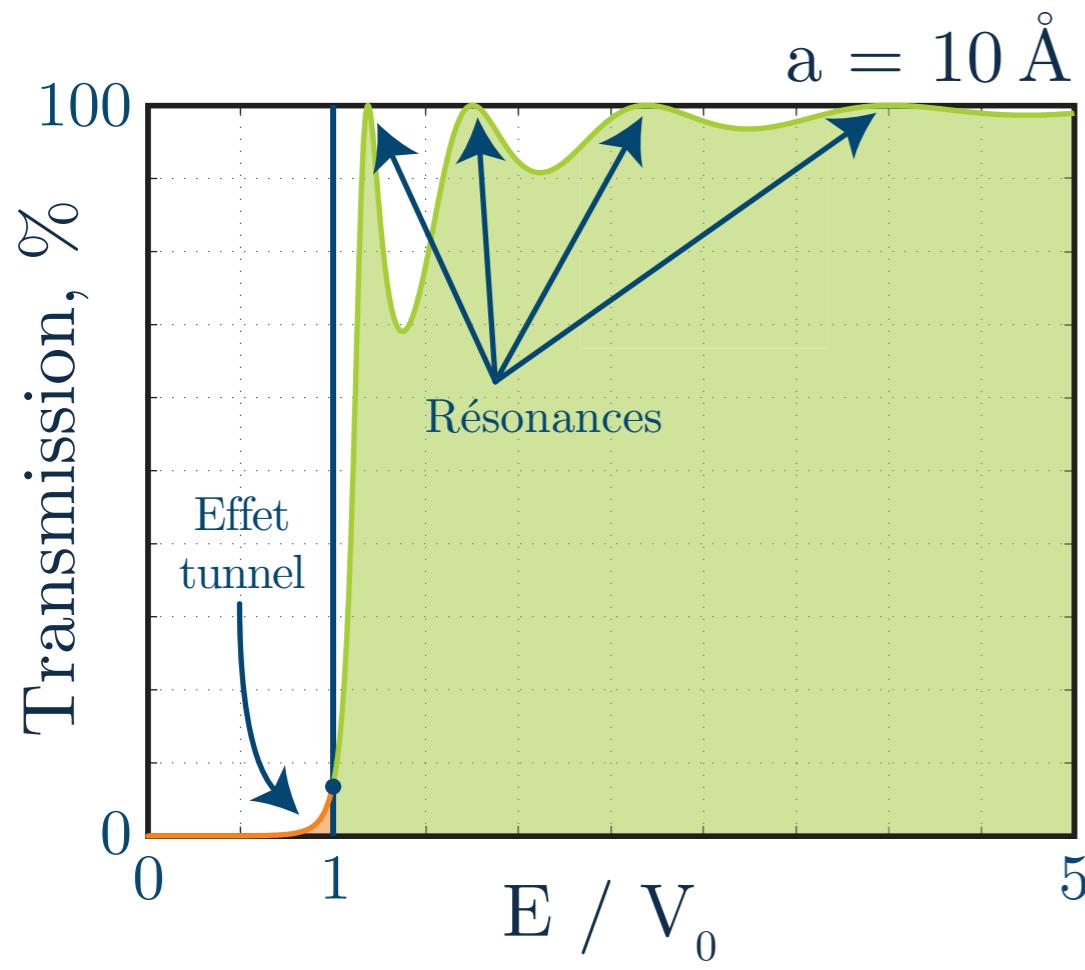
L'onde évanescante redevient propagative : couplage par onde évanescante

Potentiel
Densité de probabilité de présence



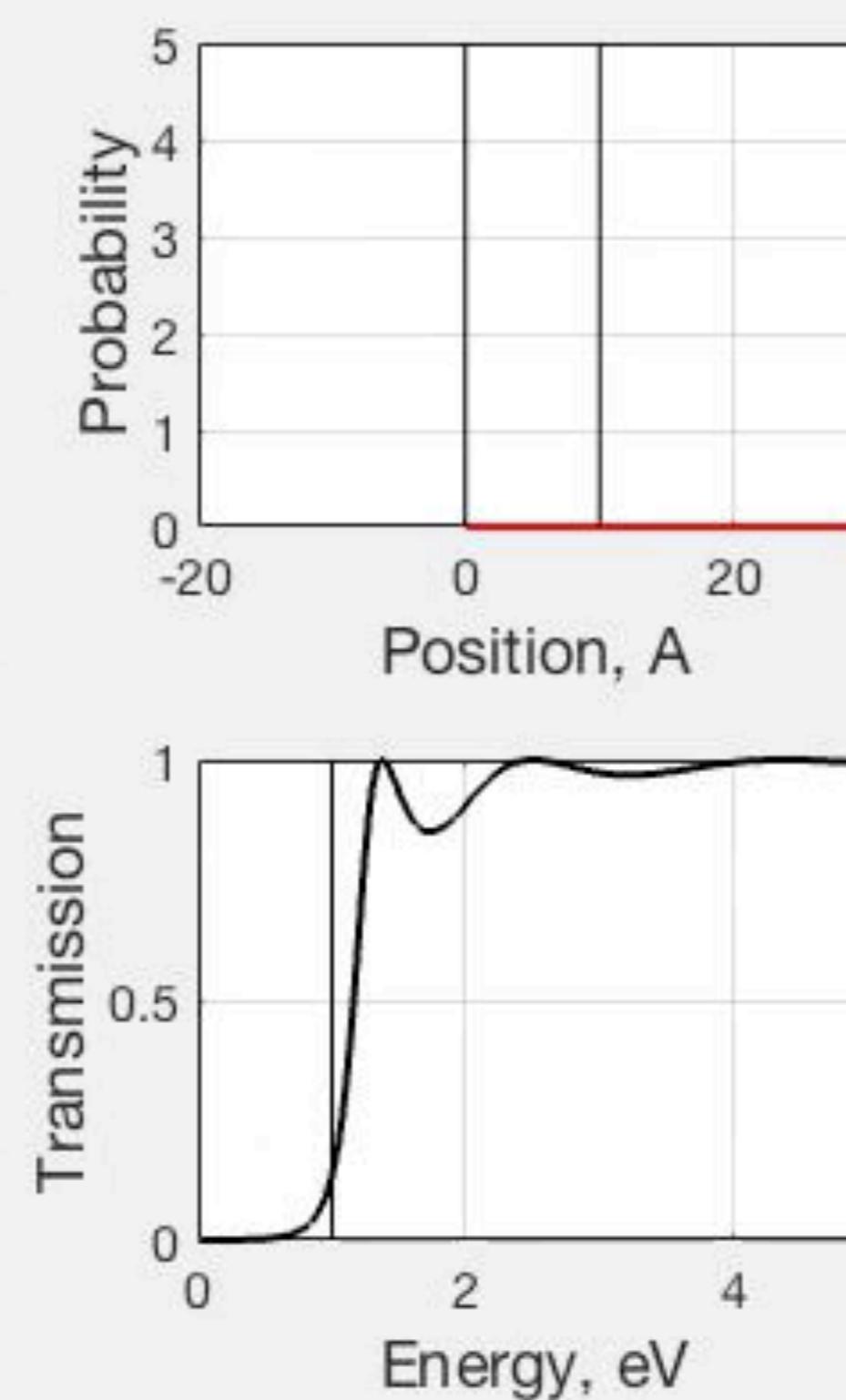
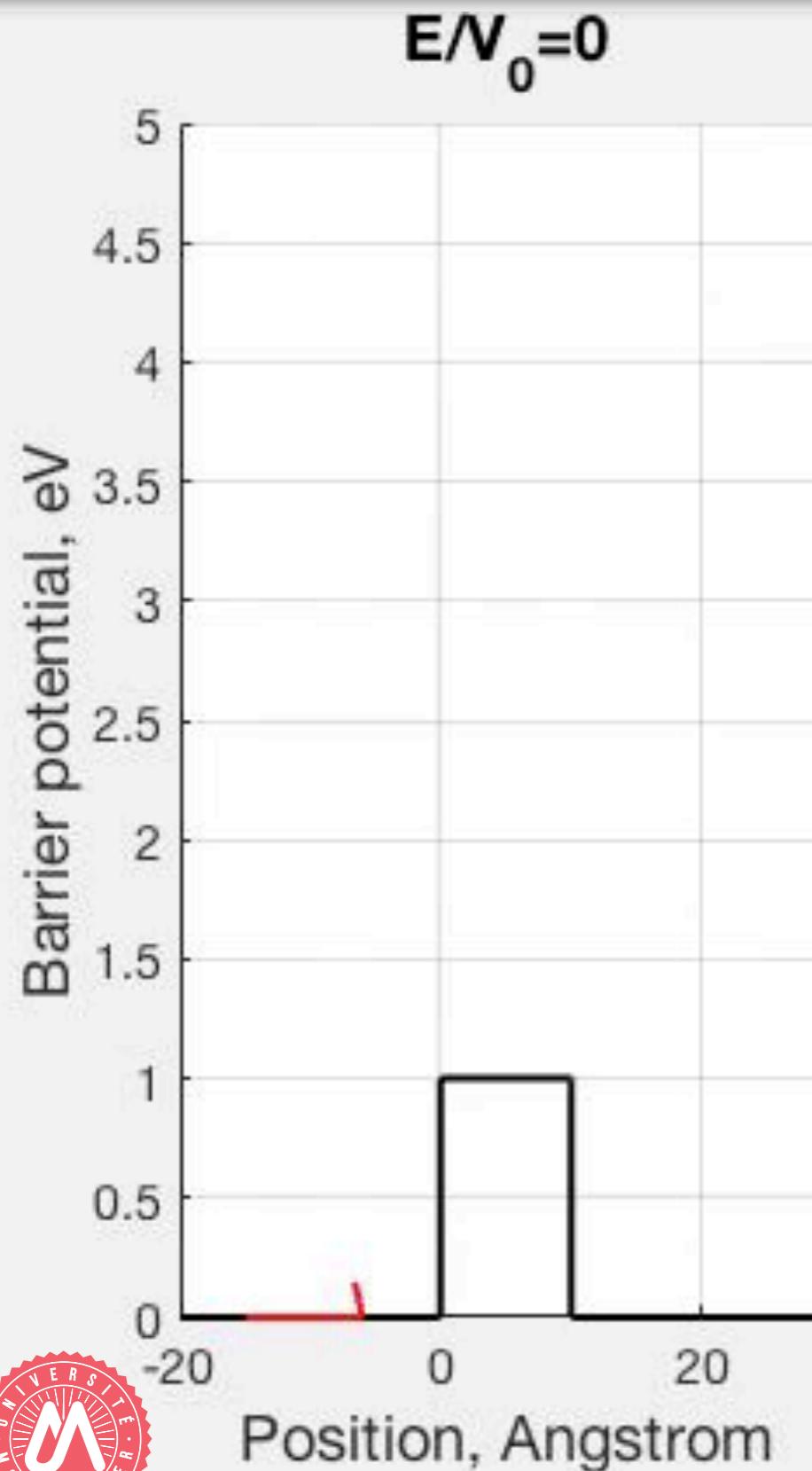
3. Barrière de potentiel

Bilan sur la transmission par la barrière de potentiel





3. Barrière de potentiel





4. Puits de potentiel fini

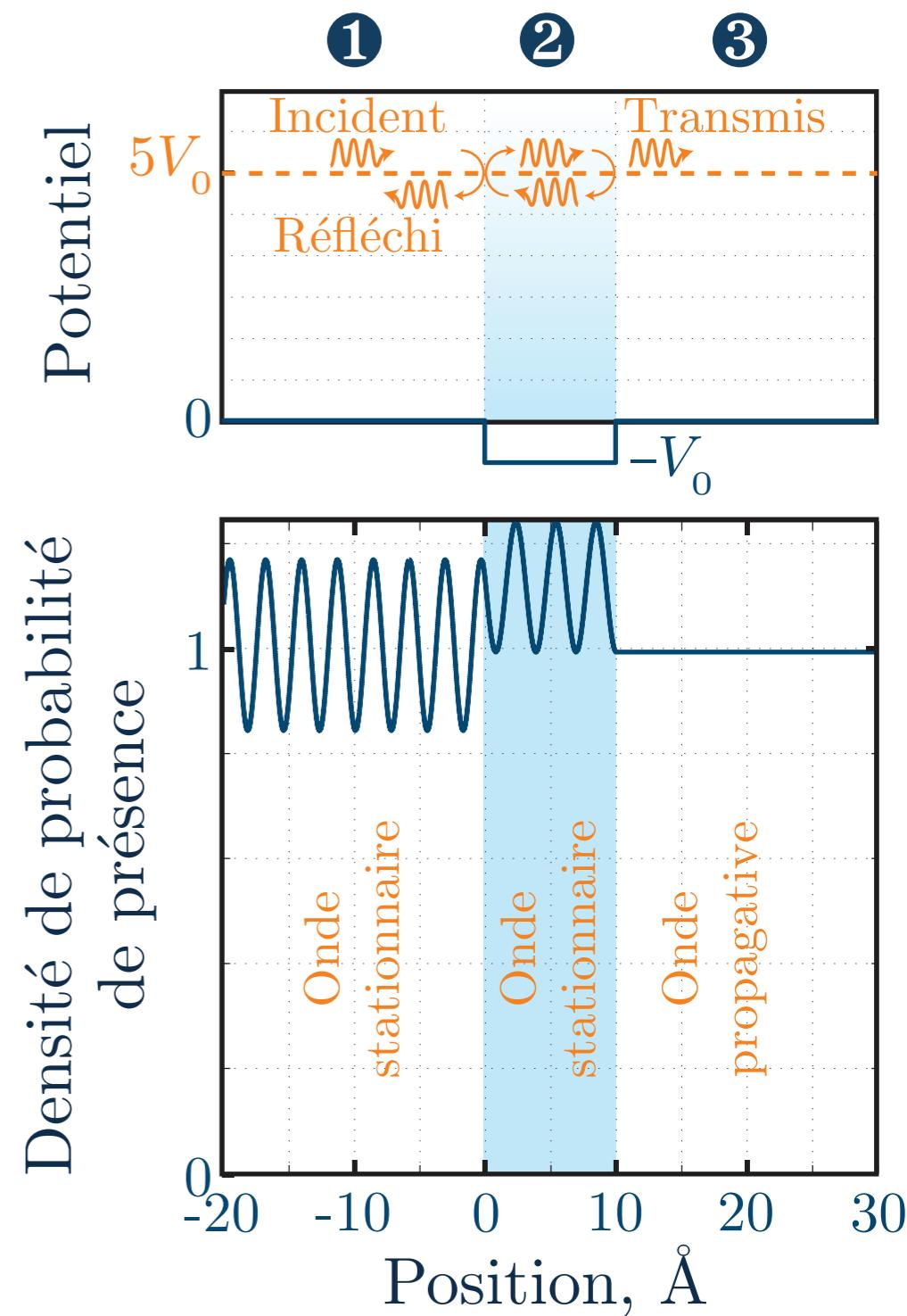
Particule incidente d'énergie supérieure au puits ($E > V_0$)

Considérons un puits de potentiel à une dimension : potentiel valant $-V_0$ entre $x = -a/2$ et $x = a/2$, nul sinon

Les solutions se déduisent de celles pour la barrière de potentiel pour une énergie incidente supérieure à celle de la barrière en changeant simplement le signe de V_0

Nous observons donc de manière identique :

- Une réflexion de l'onde incidente au niveau du puits
- Une onde stationnaire dans la région du puits
- Une onde propagative après le puits
- La transmission à travers le puits dépend de l'énergie





4. Puits de potentiel fini

Puits de potentiel fini pour $-V_0 < E < 0$

Considérons un puits de potentiel à une dimension :

potentiel valant $-V_0$ entre $x = -a/2$ et $x = a/2$, nul sinon

Équations de Schrödinger

- Domaines ① et ③ : $\varphi'' + (2m/\hbar^2) E \varphi = 0$
- Domaine ② : $\varphi'' + (2m/\hbar^2) (E + V_0) \varphi = 0$

On pose : $k_1^2 = -2m E/\hbar^2$ et $k_2^2 = 2m (V_0 + E)/\hbar^2$

Forme des solutions :

- Domaine ① : $\varphi = A_1 e^{k_1 x} + \cancel{B_1 e^{-k_1 x}}$

Solutions evanescentes

Afin d'éviter toute divergence énergétique $B_1 = 0$

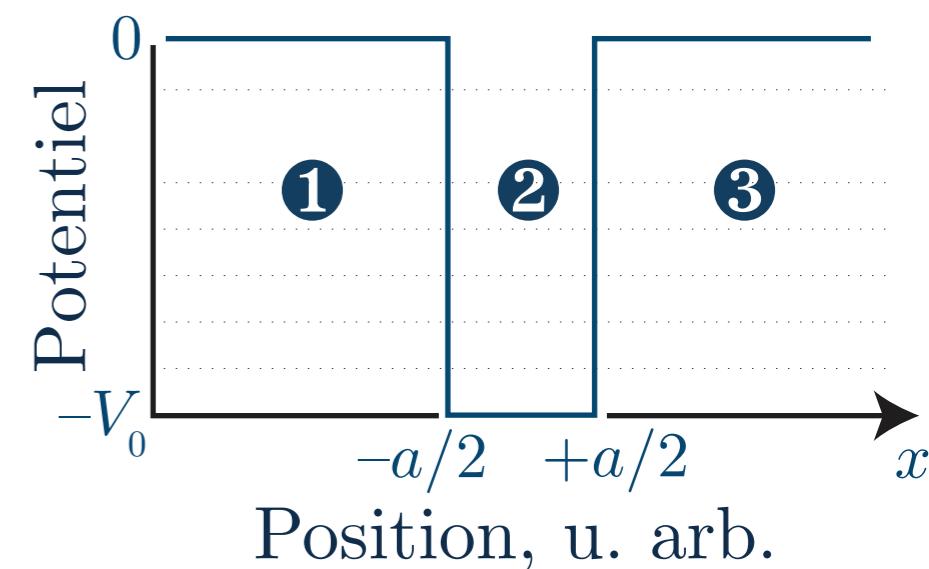
- Domaine ② : $\varphi = A_2 e^{+i k_2 x} + B_2 e^{-i k_2 x}$

Solutions propagatives dans les deux directions

- Domaine ③ : $\varphi = \cancel{A_3 e^{k_1 x}} + B_3 e^{-k_1 x}$

Solutions évanescentes

Afin d'éviter toute divergence énergétique $A_3 = 0$





4. Puits de potentiel fini

Puits de potentiel fini pour $-V_0 < E < 0$

Relations de continuité :

Nous posons les relations de continuité en $-a/2$

et exprimons A_2 et B_2 en fonction de A_1

$$A_2 = A_1 \frac{k_2 - i k_1}{2 k_2} e^{i k_2 a/2} e^{-k_1 a/2}$$

$$B_2 = A_1 \frac{k_2 + i k_1}{2 k_2} e^{-i k_2 a/2} e^{-k_1 a/2}$$

Nous posons les relations de continuité en $+a/2$

et exprimons A_2 et B_2 en fonction de B_3

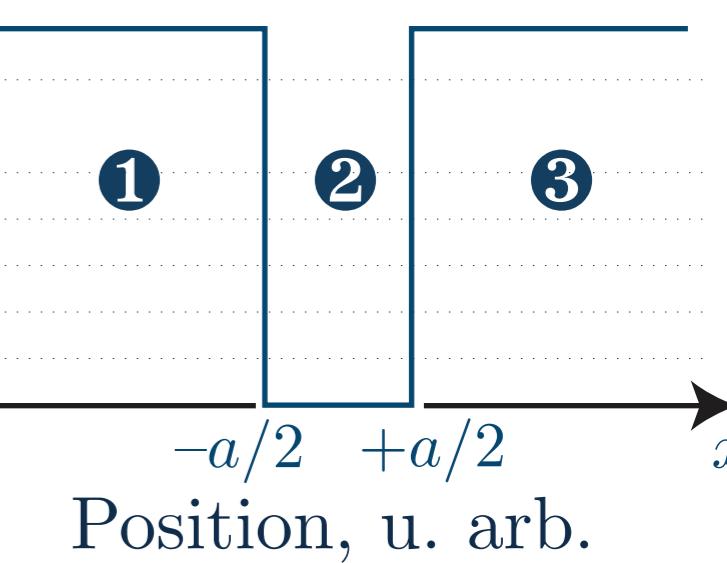
$$A_2 = B_3 \frac{k_2 + i k_1}{2 k_2} e^{-i k_2 a/2} e^{-k_1 a/2}$$

$$B_2 = B_3 \frac{k_2 - i k_1}{2 k_2} e^{i k_2 a/2} e^{-k_1 a/2}$$

Nous déduisons de l'égalité des deux expressions de A_2 ,

et de l'égalité des deux expressions de B_2

$$\left. \begin{array}{l} \frac{B_3}{A_1} = \frac{k_2 - i k_1}{k_2 + i k_1} e^{i a k_2} \\ \frac{B_3}{A_1} = \frac{k_2 + i k_1}{k_2 - i k_1} e^{-i a k_2} \end{array} \right\} \quad \left(\frac{k_2 - i k_1}{k_2 + i k_1} \right)^2 = e^{-i 2 a k_2}$$



$k_{1,2}$ fonctions de E
→ quantification énergétique
 (similaire au puits infini)





4. Puits de potentiel fini

Puits de potentiel fini pour $-V_0 < E < 0$

Discretisation énergétique dans le puits :

- Premier cas (fonctions paires) :**

$$\frac{k_2 - i k_1}{k_2 + i k_1} = +e^{-i k_2 a}$$

Des expressions de A_2 et B_2 nous déduisons alors $A_2 = B_2$

→ **ce cas correspond aux fonctions d'ondes paires dans le puits**

L'identification des phases amène à réécrire cette équation : $\frac{k_1}{k_2} = \tan(k_2 a/2)$

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Utilisons } 1/\cos^2(x) = 1 + \tan^2(x) \\ \text{posons } k_0 = \sqrt{k_1^2 + k_2^2} \end{array} \right.$$

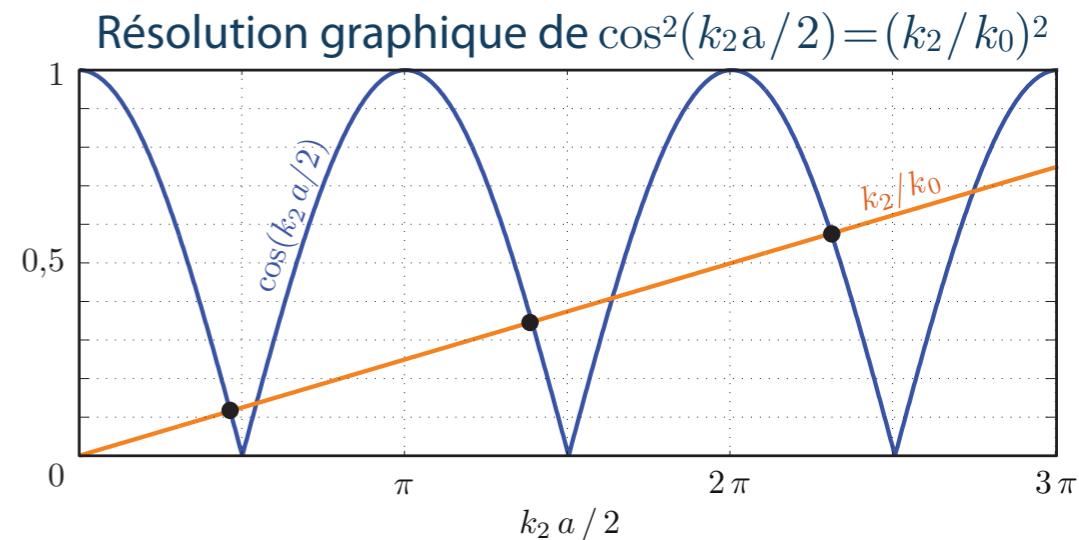
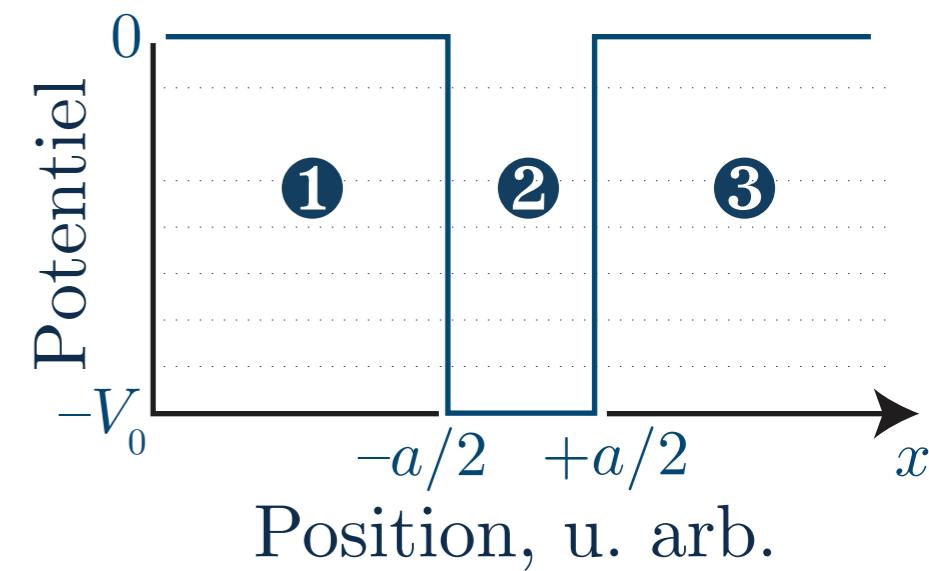
il suffit alors de résoudre graphiquement :

$$\cos^2(k_2 a/2) = (k_2/k_0)^2$$

- Deuxième cas (fonctions impaires) :**

De même, il suffit de résoudre graphiquement :

$$\sin^2(k_2 a/2) = (k_2/k_0)^2$$





Avant-propos

A. Dualité onde-corpuscule

B. Équation de Schrödinger

C. Diffusion par un potentiel dans l'espace

D. Orbitales atomiques

1. Modèle de Bohr de l'atome d'hydrogène
2. Modèle quantique
3. Spin
4. Orbitales
5. Remplissage électronique

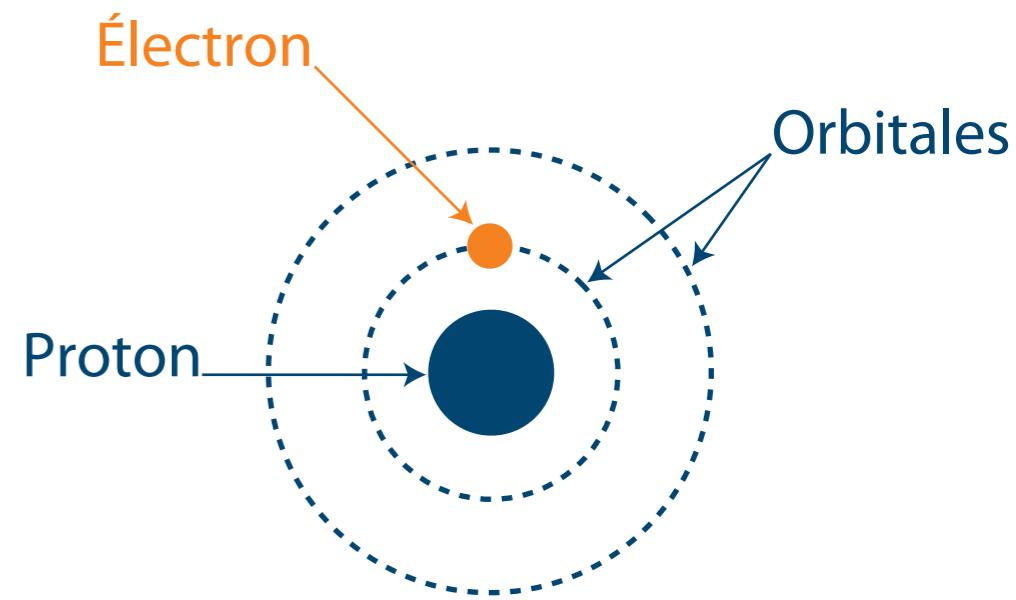




1. Modèle de Bohr de l'atome d'hydrogène

a) Modèle planétaire de Bohr (1913)

Électron de charge $-e$, de masse m_e et de vitesse v gravitant avec un mouvement circulaire uniforme autour d'un proton de charge $+e$



Étude du mouvement de l'électron

• Énergie E de l'électron :

- énergie potentielle E_p
- énergie cinétique E_c

$$E = E_c + E_p = \frac{1}{2} m_e v^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} \quad (1)$$

• Relation fondamentale de la dynamique :

- Force de Coulomb : $F = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2}$
- Accélération pour un mouvement circulaire uniforme : $\frac{v^2}{r}$

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} = \frac{m_e v^2}{r} \quad (2)$$

• Discréétisation des orbites observées expérimentalement

Spectre visible de l'hydrogène :



<http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/hydro.html#c4>

$$m_e v r = \hbar n \quad (3)$$

n entier naturel non nul





1. Modèle de Bohr de l'atome d'hydrogène

Des relations (1) et (2) nous déduisons facilement : $E = -\frac{1}{8\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}$

Or d'après (2) : $\frac{1}{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{m_e v^2 r^2} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2 m_e}{(m_e v r)^2}$, soit en utilisant (3) : $\frac{1}{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{m_e e^2}{n^2 \hbar^2}$

Nous déduisons alors pour chaque orbitale de nombre quantique principal n :

- ✿ Rayon de gravitation r_n de l'électron : $r_n = n^2 a_0$ avec $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0}{m_e} \frac{\hbar^2}{e^2}$
- ✿ Énergie E_n de l'électron : $E_n = -\frac{1}{n^2} E_I$ avec $E_I = \frac{m_e e^4}{8\hbar^2 \epsilon_0^2}$
- ✿ Vitesse v_n de l'électron : $v_n = \frac{1}{n} v_0$ avec $v_0 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{\hbar}$

Application numérique

- $E_I = 13,6 \text{ eV}$
- $a_0 = 0,53 \text{ \AA}$



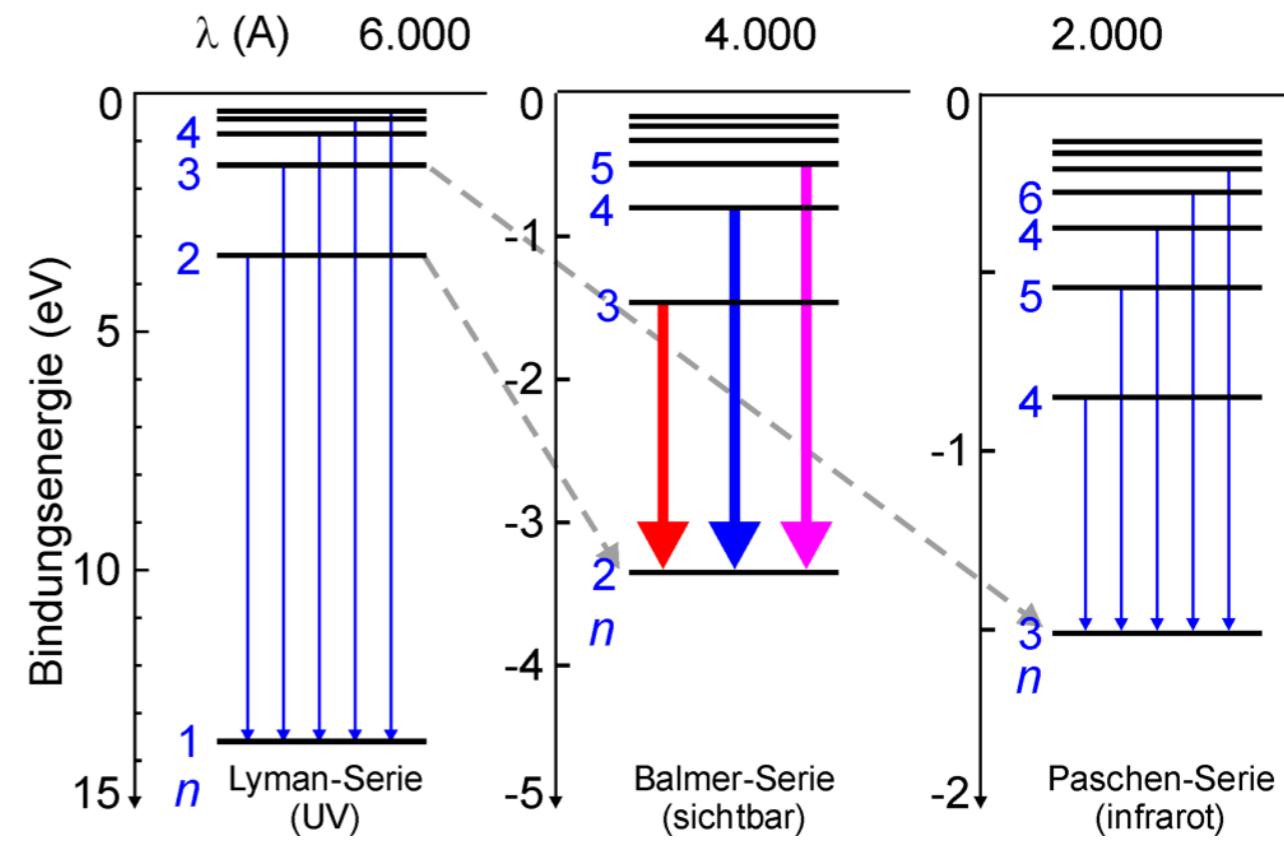
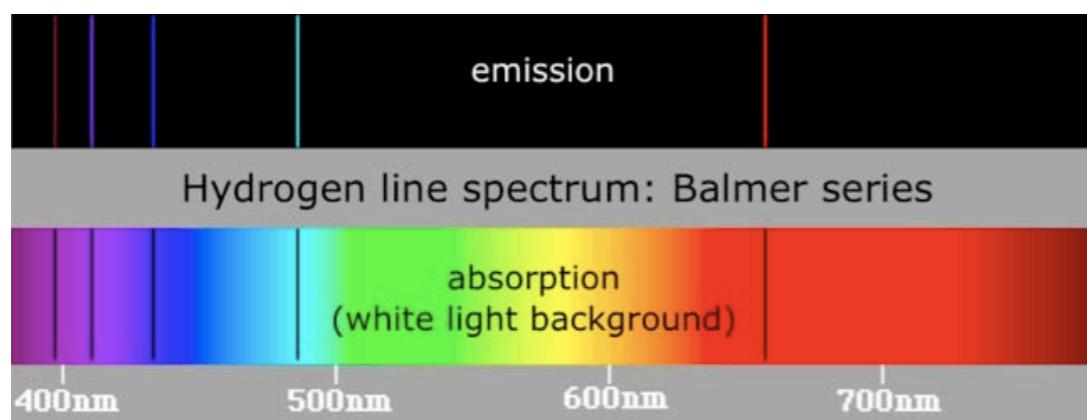
→ Excellent accord avec les observations expérimentales !



1. Modèle de Bohr de l'atome d'hydrogène

• Séries de Lyman, Balmer & Paschen

- Désexcitations radiatives vers le niveau fondamental E_1, E_2 & E_3
=> émission/absorption UV, visible ou IR



http://www.ipf.uni-stuttgart.de/lehre/online-skript/f30_02.html

<http://scienceblogs.de/primaklima/2009/07/16/zahlenmystik-quantenphysik-und-schmutzige-tucher/>



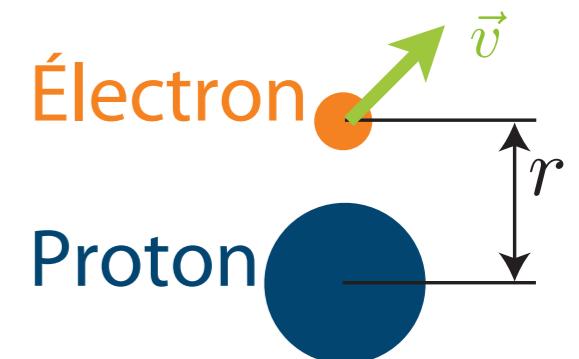


2. Modèle quantique

b) Équation de Schrödinger pour l'atome d'hydrogène

💡 Système

- Électron et proton séparés d'une distance r



💡 Opérateurs en présence

- Opérateur énergie cinétique caractérisant la vitesse de l'électron : $-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta$
- Énergie potentielle liée à l'interaction Coulombienne : $-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}$

💡 Équation de Schrödinger caractéristique du système :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \right] \psi = E \psi$$

La résolution de cette équation aux valeurs propres donne a priori :

des vecteurs propres (fonctions d'ondes) ψ_n associés aux valeurs propres (énergies) E_n

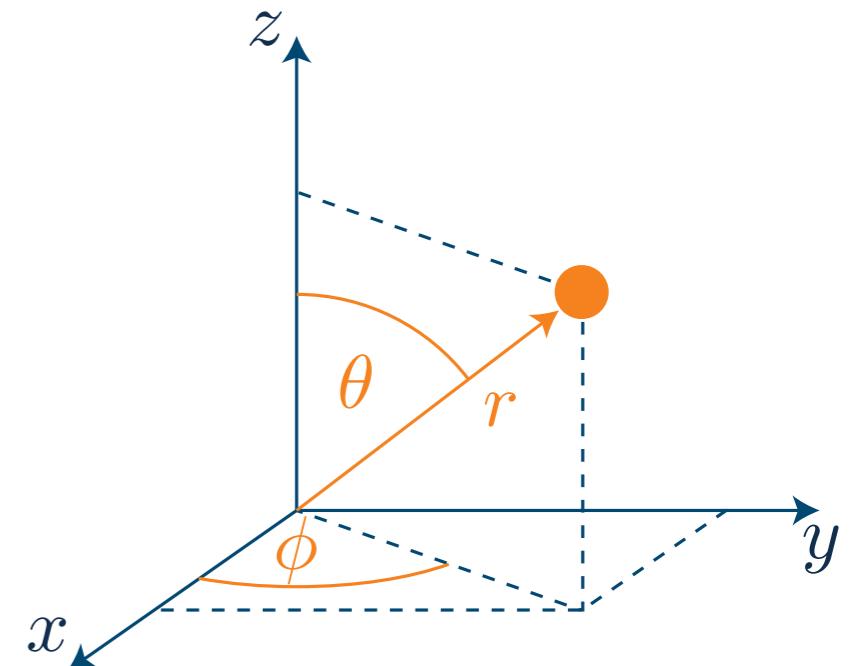




2. Modèle quantique

Résolution de l'équation

- ➊ Passage en coordonnées sphériques à l'image de la géométrie du système : $\psi = \psi(r, \theta, \phi)$
- ➋ Séparation des variables : $\psi = R(r) Y(\theta, \phi)$ avec :
 - $R(r)$ la fonction radiale
 - $Y(\theta, \phi)$ l'harmonique sphérique
- ➌ La résolution (complexe) de cette équation donne un ensemble **discret** de solutions $\psi_{n,m,l}$ caractérisées par trois indices :
 - n nombre quantique principal de \mathbb{N}^*
 - l nombre quantique azimuthal de \mathbb{N} tel que $l \in [0, n-1]$
 - m nombre quantique magnétique de \mathbb{Z} tel que $|m| \in [0, l]$





2. Modèle quantique

💡 Les fonctions d'ondes solutions sont :

- Fonction radiale : $R_{n,l}(r) = \sqrt{\left(\frac{2}{na_0}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}} e^{\frac{-r}{na_0}} \left(\frac{2r}{na_0}\right)^l L_{n-l-1}^{2l+1} \left(\frac{2r}{na_0}\right)$
- Harmonique sphérique : $Y_{l,m}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos(\theta)) e^{im\phi}$

où L et P sont les polynômes associés de Laguerre et Legendre définis ci-dessous :

- polynômes associés de Laguerre : $L_q^p(x) = \frac{x^{-p} e^x}{q!} \frac{\partial^q}{\partial x^q} \{e^{-x} x^{q+p}\}$
- polynômes associés de Legendre : $P_l^m(x) = (1-x^2)^{m/2} \frac{(-1)^m}{2^l l!} \frac{\partial^{l+m}}{\partial x^{l+m}} (x^2 - 1)^l$

💡 Énergie du système (valeurs propres de l'équation de Schrödinger) :

$$E_n = -\frac{m_e e^4}{8 h^2 \epsilon_0^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{13,6}{n^2} \text{ eV}$$





2. Modèle quantique

Dégénérescence :

L'énergie n'est fonction **que** de l'indice quantique principal n et ne dépend pas de l ou m

- Pour un n donné, il existe n^2 états possibles de même énergie pour le système
Cette dégénérescence peut être levée en présence de champ magnétique (effet Zeeman normal)
- Compte tenu du spin (définition à venir) de l'électron, celui-ci peut avoir $2n^2$ états
Ces états de spin peuvent aussi être observés en présence de champ magnétique (effet Zeeman anormal)

n	$0 \leq l \leq n-1$	$-l \leq m \leq l$	Nombre d'états ($2.n^2$)
1	0	0	2
2	0	0	8
	1	-1, 0, 1	
3	0	0	18
	1	-1, 0, 1	
	2	-2, -1, 0, 1, 2	
...			





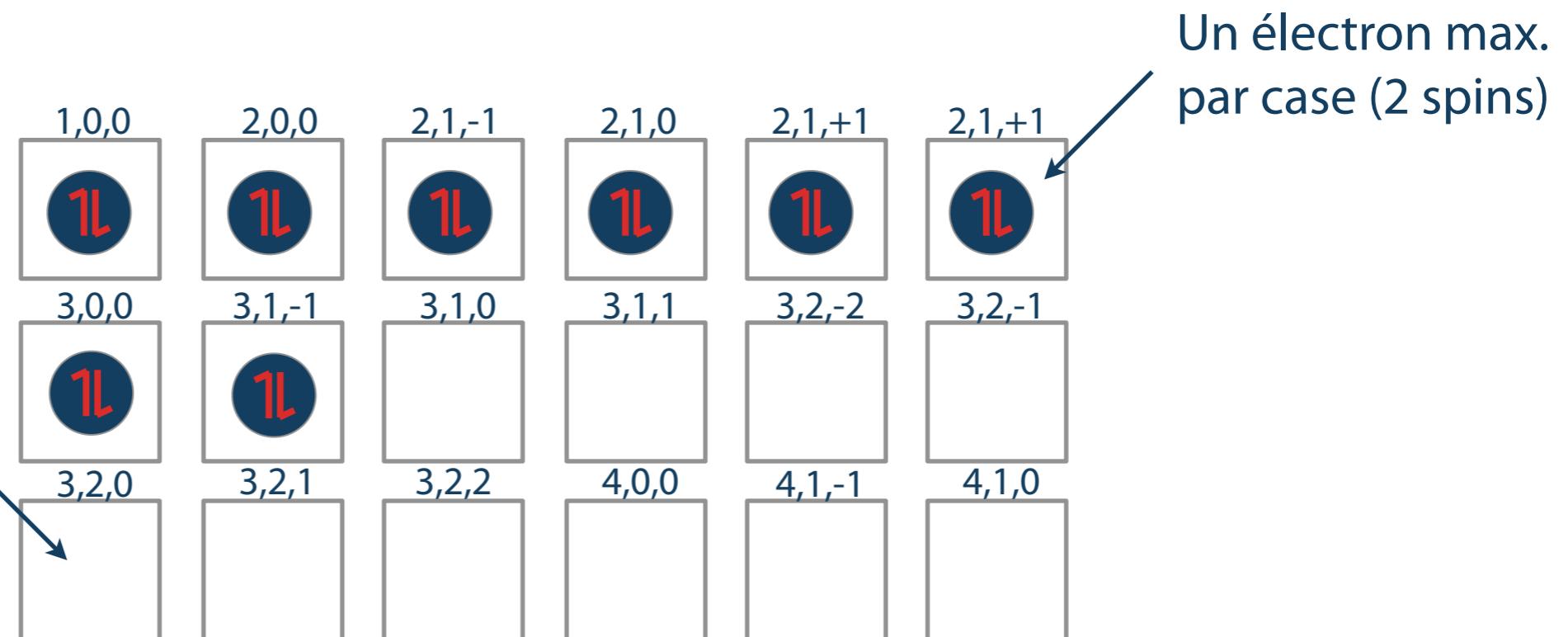
2. Modèle quantique

Principe d'exclusion de Pauli (1925) :

- Deux électrons ne peuvent se trouver exactement dans le même état quantique

Ainsi, un niveau électronique caractérisé par les nombres quantiques (n, l, m) ne peut être occupé tout au plus que par deux électrons de spin différents

Une case correspond à un état quantique (n, l, m)



3. Spin



a) Historique

Des expériences inexplicées...

Expérience de Stern-Gerlach

Dédoublement d'un faisceau d'atomes d'argent à la traversée d'un champ magnétique

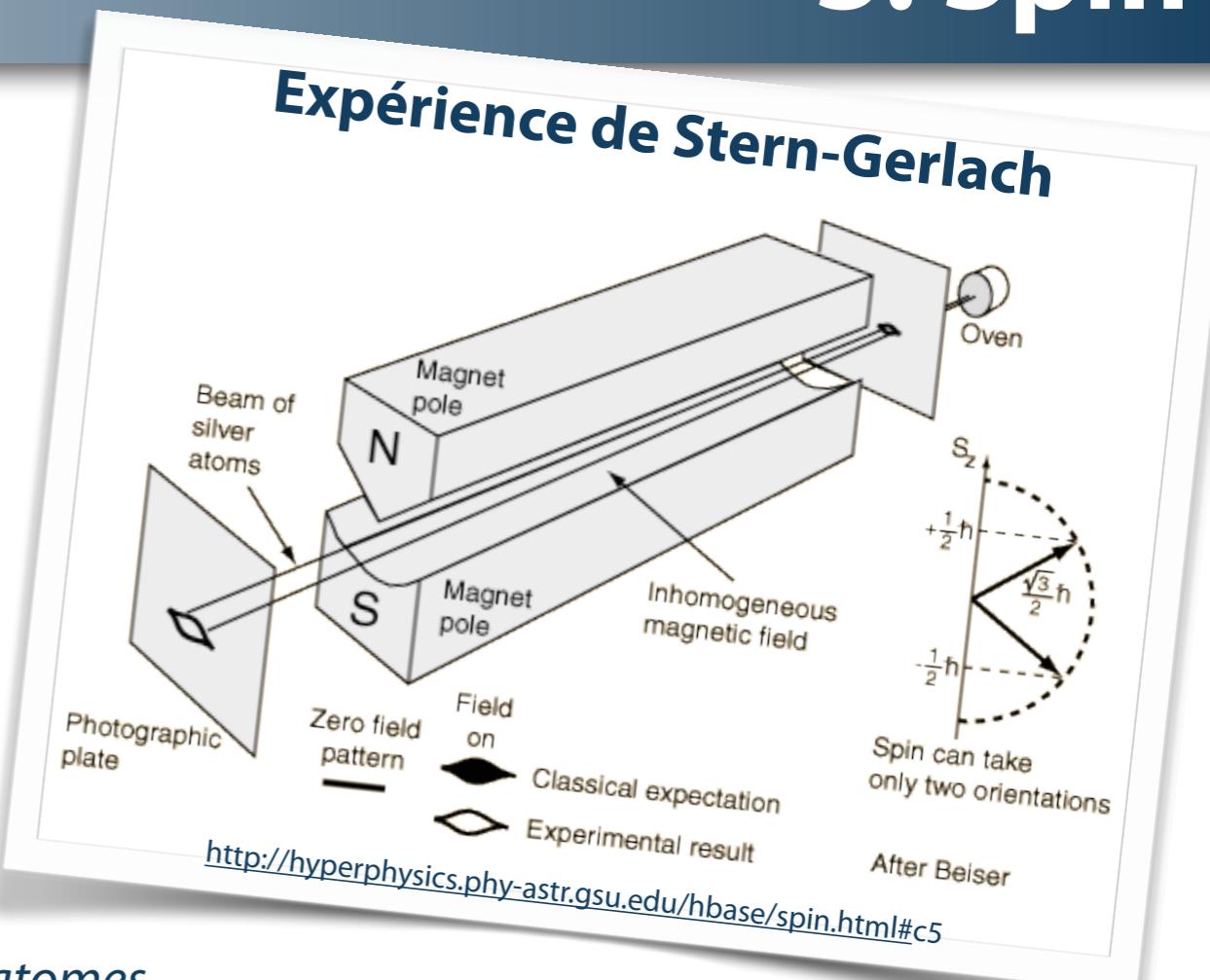
Effet Zeeman anormal

Multiplication des niveaux énergétiques de certains atomes, par exemple le sodium ou le zinc (pas pour l'hydrogène), en présence de champ magnétique

Spectroscopie fine de l'hydrogène

Une spectroscopie fine de l'hydrogène montre un dédoublement des raies spectrales

Pour le niveau 1s ce dédoublement est de 10^{-4} eV, valeur largement inférieure aux énergies typiques de transition, par exemple de 10,2 eV entre les niveaux 1s et 2p



3. Spin



b) Interprétation

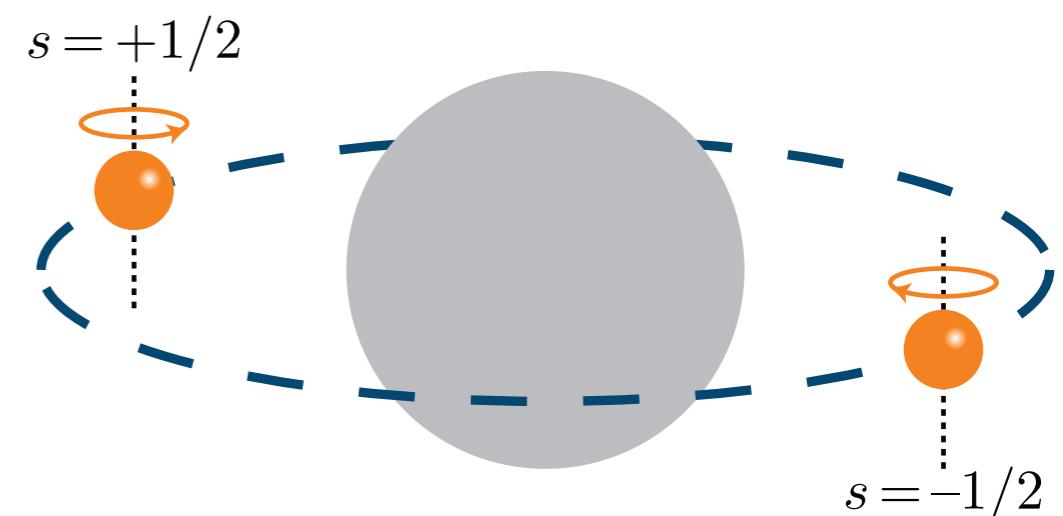
L'électron est caractérisé par une propriété propre supplémentaire : le spin

💡 Le spin représente le moment magnétique de l'électron :

- **Comme si** l'électron tournait sur lui-même :
attention ce n'est pas le cas !
- Deux sens de rotation possibles donc pour un électron

💡 Valeurs du spin :

- Chaque électron présente donc deux valeurs de spin
- La valeur du spin s est toujours un multiple de $\pm 1/2$





4. Orbitales

a) Notations spectroscopiques des niveaux énergétiques

La notation spectroscopique est constituée d'un chiffre suivi d'une lettre

- Le chiffre correspond à la valeur de n , la lettre correspond à la valeur de l
- Lettres associées aux premiers nombres quantiques azimutaux (0–10) : s p d f g h i k l m n

Nombre principal	Nombre d'états électroniques	Nombre orbital	Notation spectroscopiques	Nombre d'états relatifs à m
$n = 1$	2	$l = 0$	1s	2
$n = 2$	8	$l = 0$	2s	2
		$l = 1$	2p	6
$n = 3$	18	$l = 0$	3s	2
		$l = 1$	3p	6
		$l = 2$	3d	10

...

- Pour les atomes poly-électroniques, le nombre d'électrons présents sur chaque niveau est indiqué en exposant de la lettre associée à l , par exemple $1s^2$.



4. Orbitales



b) Orbital 1s

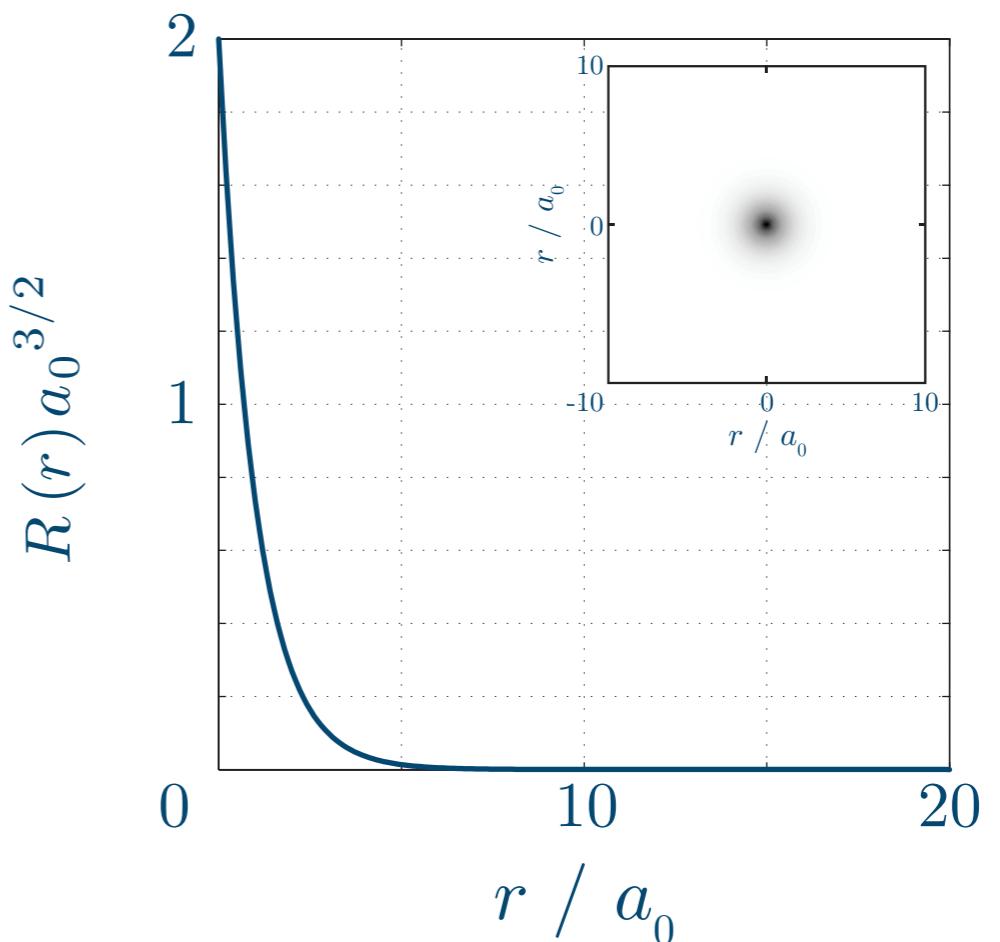
Indices quantiques :

- $n = 1$
- $l = 0$
- $m = 0$

Fonction d'onde $\psi_{n,m,l}$:

$$\psi_{1,0,0}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}$$

- Dépendance radiale : exponentielle décroissante
- Indépendance envers θ et φ .
→ ***symétrie sphérique***



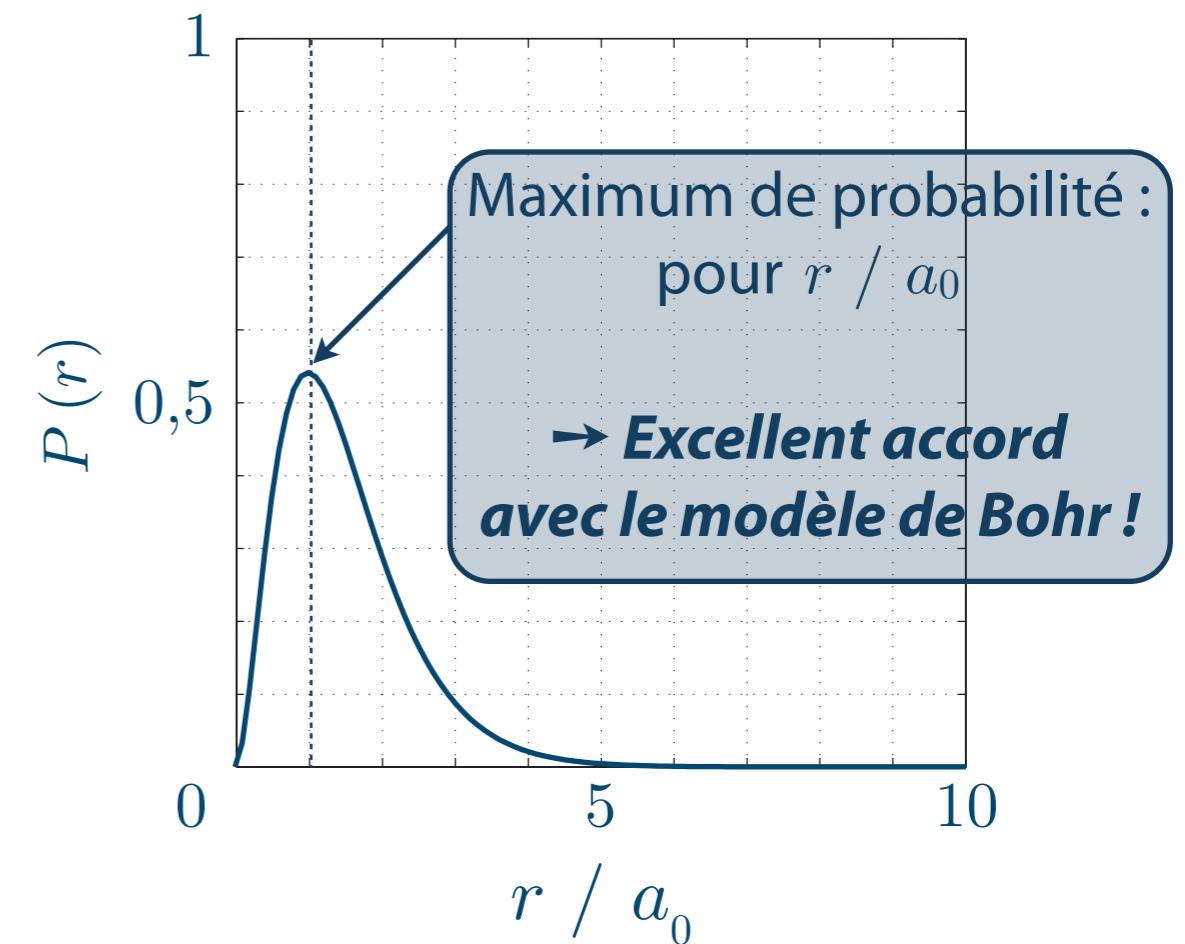
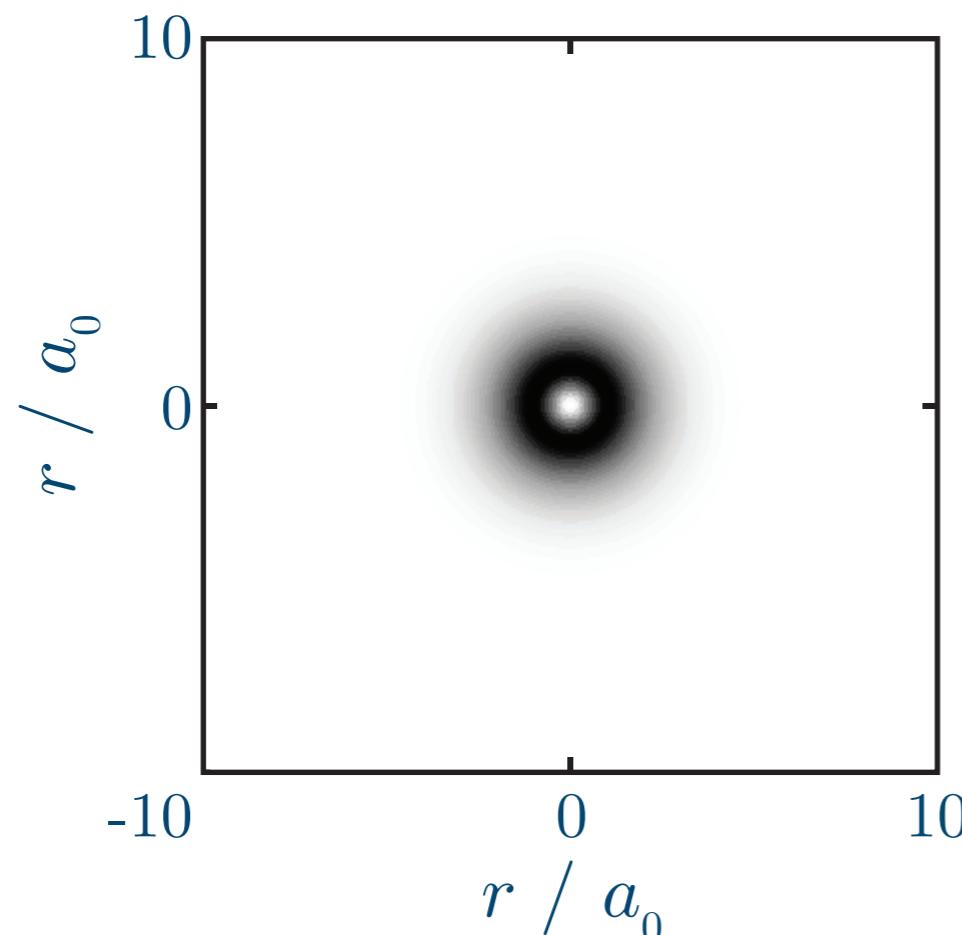


4. Orbitales

Densité radiale de probabilité de présence :

- Densité volumique de probabilité de présence de l'électron : $\rho(r, \theta, \phi) = |\psi(r, \theta, \phi)|^2$
- Densité radiale de probabilité de présence de l'électron à une distance r , soit dans le volume $4\pi r^2 dr$ ($4\pi r^2$ est la surface de la sphère de rayon r) :

$$P(r) = 4\pi r^2 |\psi(r, \theta, \phi)|^2$$





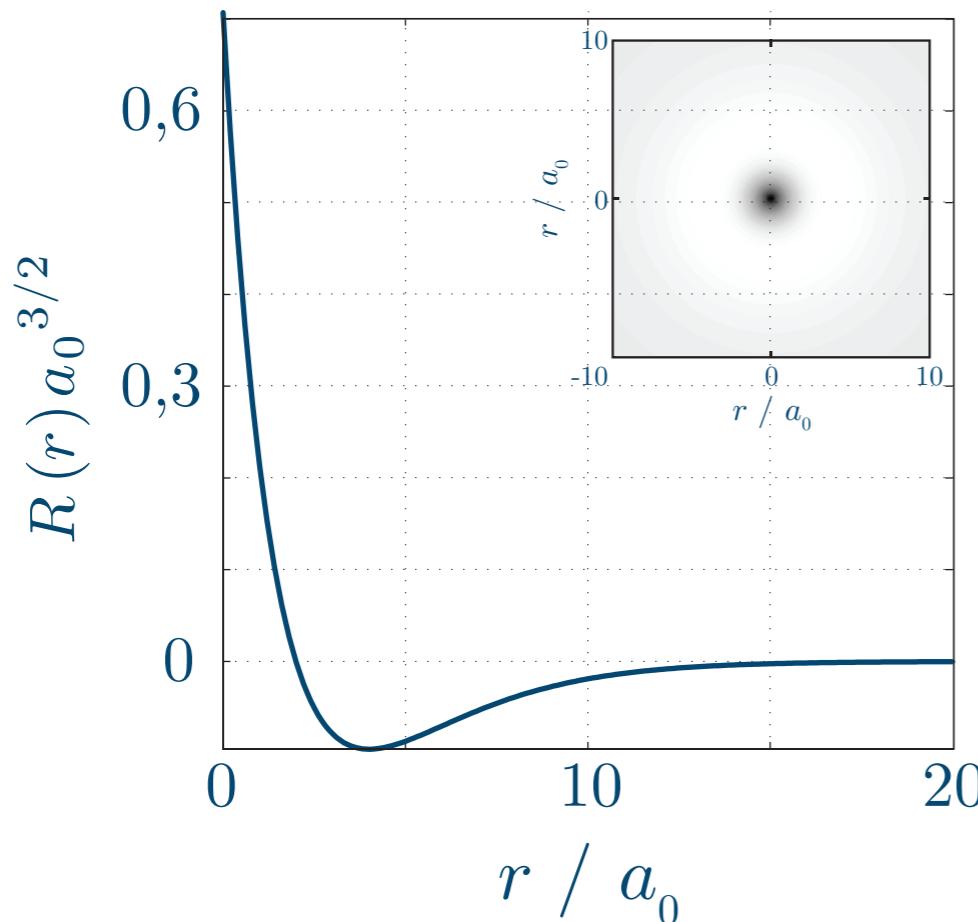
4. Orbitales

c) Orbital 2s

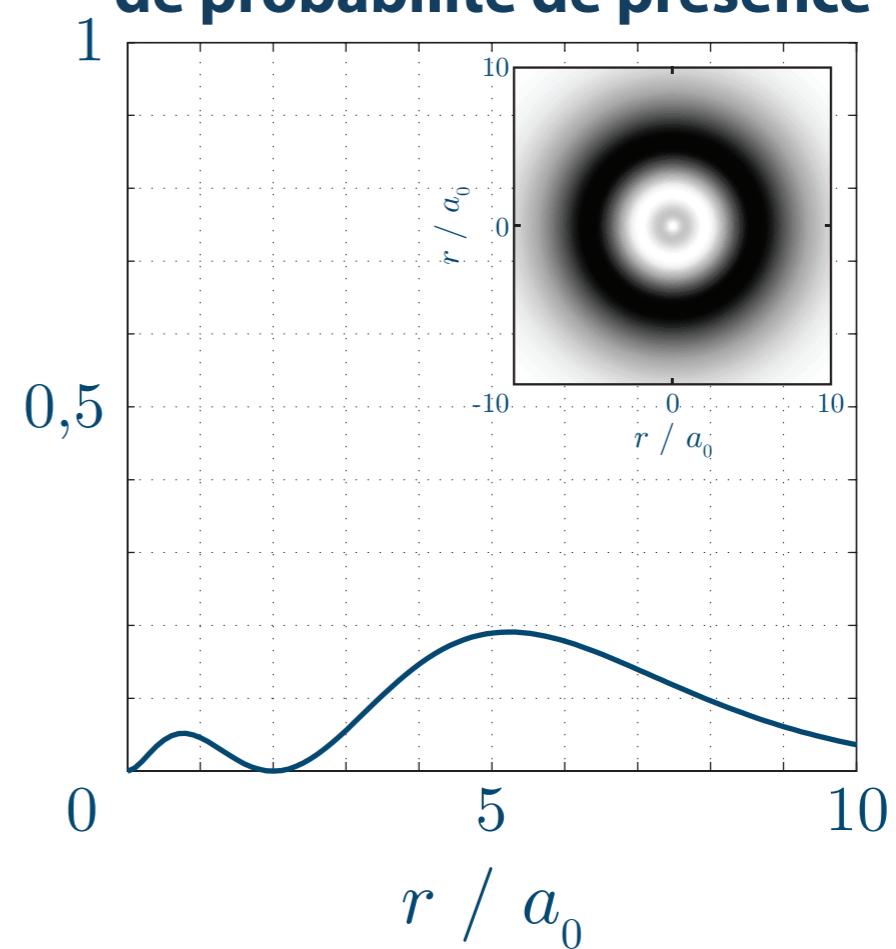
💡 Fonction d'onde $\psi_{n,m,l}$ présentant toujours une symétrie sphérique :

$$\psi_{2,0,0}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{8 \pi a_0^3}} \left(1 - \frac{r}{2 a_0}\right) e^{-r/(2 a_0)}$$

Fonction radiale



Densité radiale de probabilité de présence





4. Orbitales

d) Orbitales 2p

Indices quantiques :

- $n = 2$
- $l = 1$
- $m = -1, 0 \text{ ou } +1$

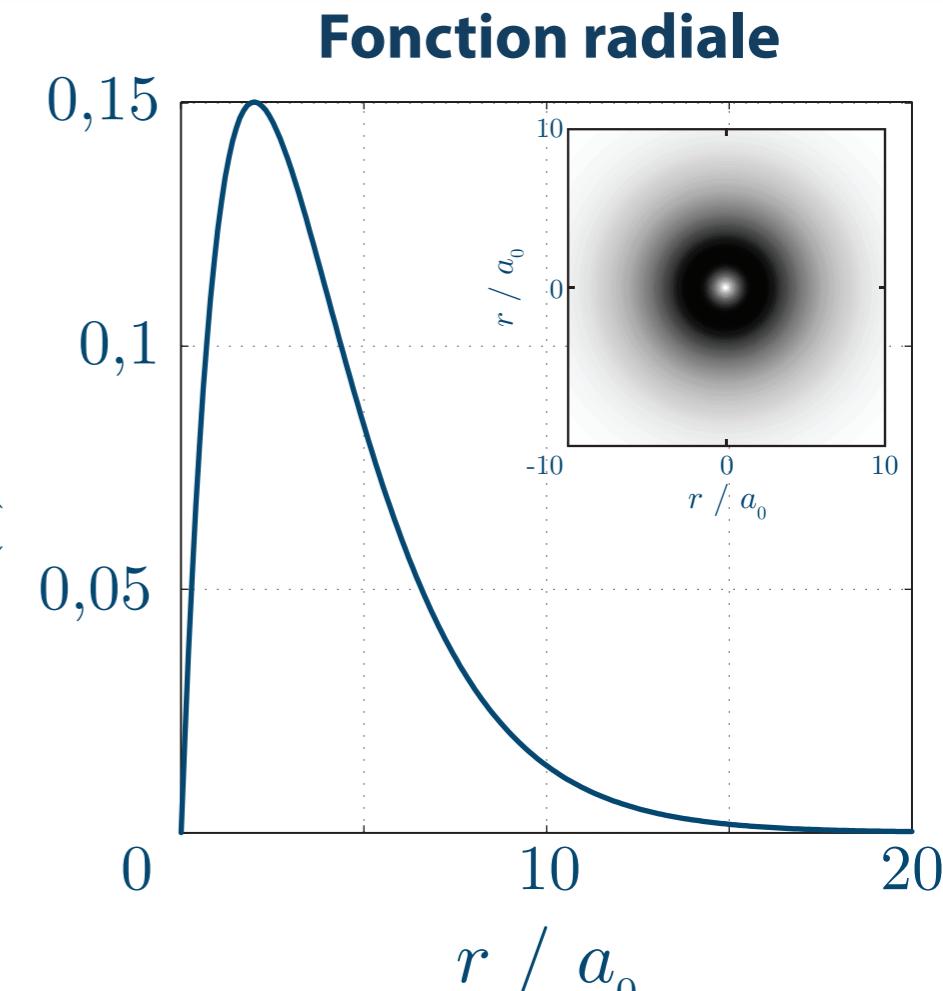
Fonctions d'onde $\psi_{n,m,l}$:

$$\psi_{2,1,1}(r, \theta, \phi) = \frac{-1}{8\sqrt{\pi}a_0^3} \frac{r}{a_0} e^{-r/(2a_0)} \sin(\theta) e^{i\phi}$$

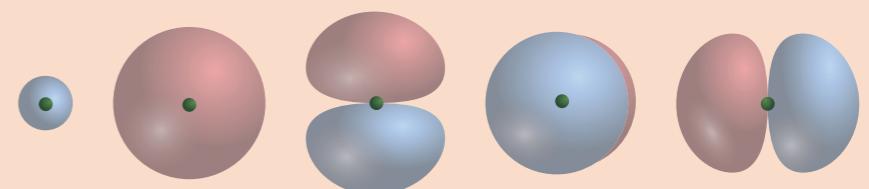
$$\psi_{2,1,0}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}a_0^3} \frac{r}{a_0} e^{-r/(2a_0)} \cos(\theta)$$

$$\psi_{2,1,-1}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{8\sqrt{\pi}a_0^3} \frac{r}{a_0} e^{-r/(2a_0)} \sin(\theta) e^{-i\phi}$$

Rupture de symétrie sphérique
→ dépendances angulaires



Représentation des fonctions d'ondes



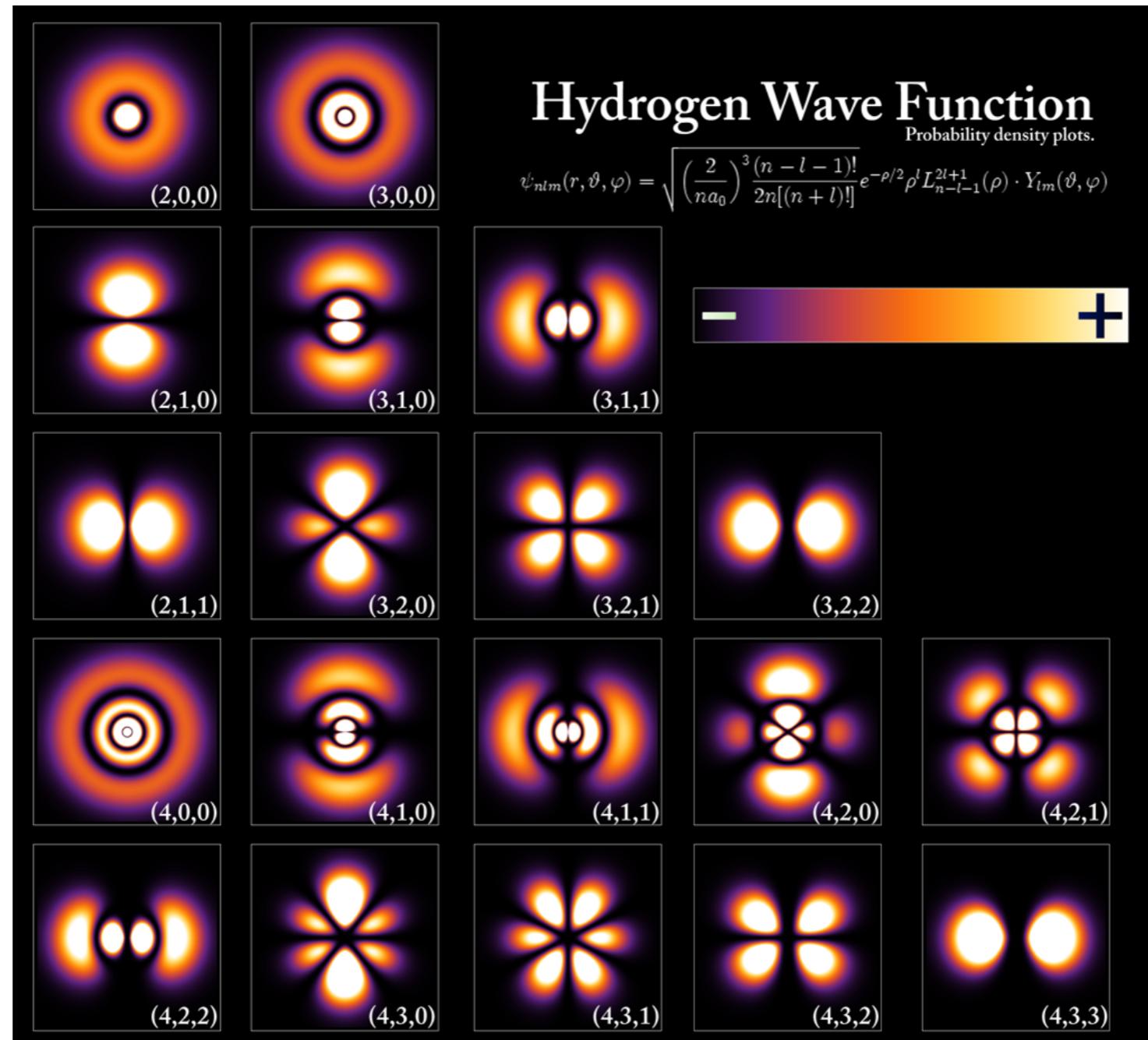
1s 2s $2p_x$ $2p_y$ $2p_z$
<http://commons.wikimedia.org/wiki/File:S-p-Orbitals.svg?uselang=fr>



4. Orbitales



e) Autres orbitales



http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Hydrogen_Density_Plots.png?uselang=fr





5. Remplissage électronique

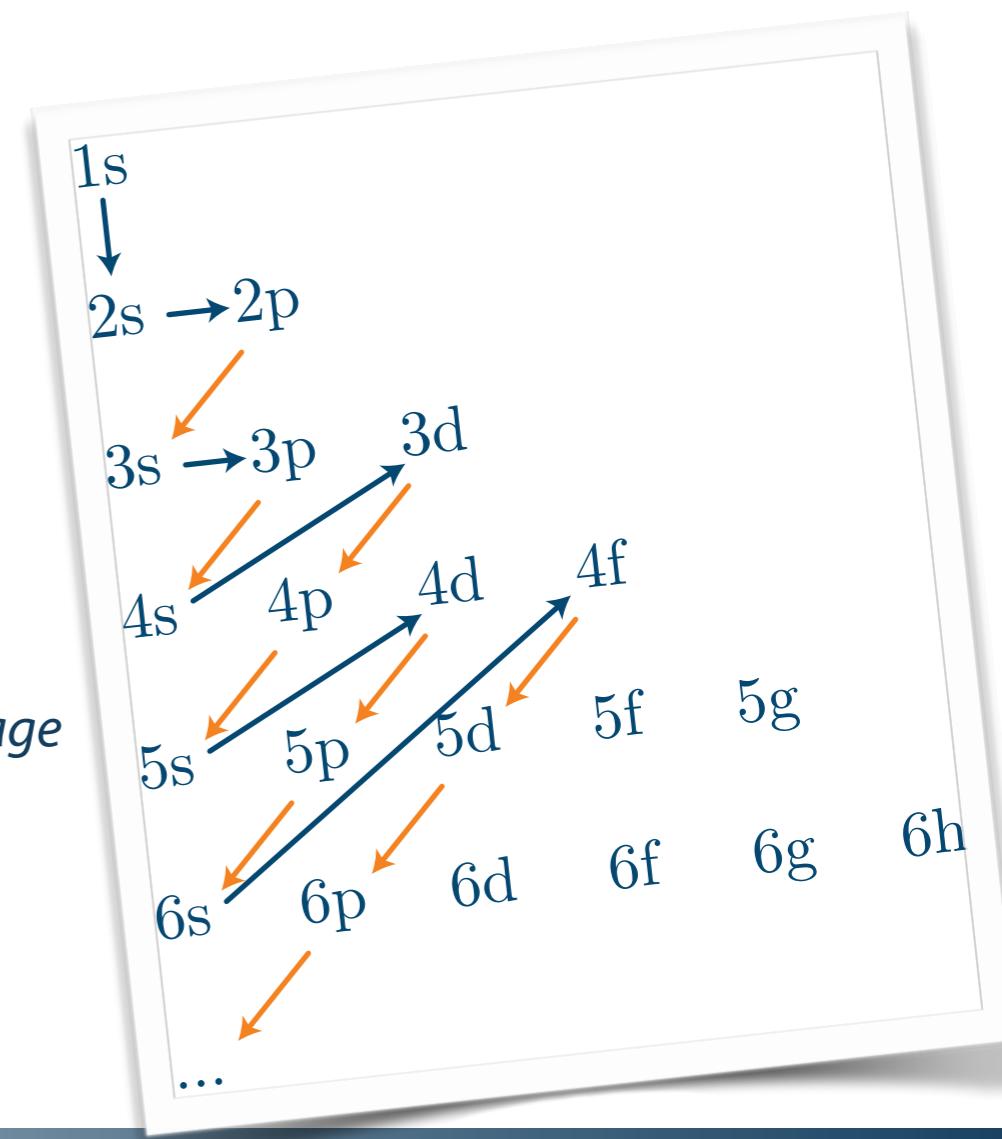
Remplissage des couches électroniques

Classification périodique des éléments de Mendeleïev

- Période (ligne) du tableau : nombre de niveaux énergétiques = nombre quantique n
- Intitulé de la colonne en chiffre romains : nombre d'électrons de valence
- Numéro atomique : nombre d'électrons

Règle de Madelung / Klechkowski

- Le remplissage des couches électroniques s'effectue dans l'ordre suivant :
1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s, 4d, 5p, 6s, 4f, ...
- Le schéma ci-contre illustre cette règle
*les flèches oranges montrent la direction principale de remplissage
les flèches bleues s'appliquent quand cette direction principale ne peut plus être respectée*





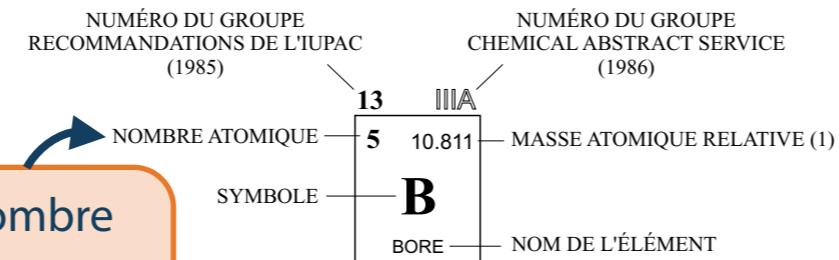
5. Remplissage électronique

Nombre de niveaux énergétiques

GROUPE		PÉRIODE	
1	IA	1	
1	H	1.0079	
	HYDROGÈNE		
2	Li	6.941	2 IIA
	LITHIUM		BÉRYLLIUM
11	Na	22.990	12 Mg
	SODIUM		MAGNÉSIUM
19	K	39.098	Ca
	POTASSIUM		CALCIUM
37	Rb	85.468	Sc
	RUBIDIUM		SCANDIUM
55	Cs	132.91	Ti
	CÉSIUM		TITANE
87	Fr	88 (223)	V
	FRANCIUM		VANADIUM
104	Ra	88 (226)	Cr
	RADIUM		CHROME
105	Ac-Lr	89-103	Mn
	Actinides		MANGANESE
106	Rf	(261)	Fe
	RUTHERFORDIUM		FER
107	Db	(262)	Co
	DUBNIUM		COBALT
108	Sg	(264)	Ni
	SEABORGIUM		NICKEL
109	Bh	(277)	Cu
	BOHRIUM		CUIVRE
110	Hs	(281)	Zn
	HASSIUM		ZINC
111	Mt	(272)	Ga
	MEITNERIUM		GALLIUM
112	Uun	(285)	Ge
	UNUNNILIUM		GERMANIUM
113	Uub		As
	UNUNUNIUM		ARSENIC
114	Uuq		Se
	UNUNQUADRIUM		SÉLÉNIUM

TABLEAU PÉRIODIQUE DES ÉLÉMENS

<http://www.ktf-split.hr/periodni/fr/>



13	IIIA	14	IVA	15	VA	16	VIA	17	VIIA
5	10.811	6	12.011	7	14.007	8	15.999	9	18.998
B	BORE	C	CARBONE	N	AZOTE	O	OXYGÈNE	F	FLUOR
13	26.982	14	28.086	15	30.974	16	32.065	17	35.453
Al	ALUMINIUM	Si	SILICIUM	P	PHOSPHORE	S	SOUFRE	Cl	CHLORE
31	69.723	32	72.64	33	74.922	34	78.96	35	79.904
Ga	GALLIUM	Ge	GERMANIUM	As	ARSENIC	Se	SÉLÉNIUM	Br	KRYPTON
31	69.723	32	72.64	33	74.922	34	78.96	35	79.904
In	INDIUM	Sn	ETAIN	Sb	ANTIMOINE	Te	TELLURE	I	XÉNON
49	114.82	50	118.71	51	121.76	52	127.60	53	126.90
Cd	CADMIDIUM	In	ETAIN	Sb	TELLURE	I	XÉNON		
80	200.59	81	204.38	82	207.2	83	208.98	84	(209)
Hg	MERCURE	Tl	THALLIUM	Pb	PLOMB	Bi	BISMUTH	Po	ASTATE
80	200.59	81	204.38	82	207.2	83	208.98	84	(209)
111	(272)	112	(285)	113	(289)	114	(289)		
Uuu	UNUNUNIUM	Uub	UNUNBIUM	Uuq	UNUNQUADRIUM				

Lanthanides

57	138.91	58	140.12	59	140.91	60	144.24	61	(145)	62	150.36	63	151.96	64	157.25	65	158.93	66	162.50	67	164.93	68	167.26	69	168.93	70	173.04	71	174.97
La	CÉRIUM	Ce	PRASÉODYME	Nd	NÉODYME	Pm	PROMÉTHIUM	Sm	SAMARIUM	Eu	EUROPIUM	Gd	GADOLINIUM	Tb	TERBIUM	Dy	DYSPROSIDIUM	Ho	HOLMIUM	Er	ERBIUM	Tm	THULIUM	Yb	YTTERBIUM	Lu	LUTÉTIUM		

Actinides

89	(227)	90	232.04	91	231.04	92	238.03	93	(237)	94	(244)	95	(243)	96	(247)	97	(247)	98	(251)	99	(252)	100	(257)	101	(258)	102	(259)	103	(262)
Ac	ACTINIUM	Th	THORIUM	Pa	PROTACTINIUM	U	URANIUM	Np	NEPTUNIUM	Pu	PLUTONIUM	Am	AMÉRICAUM	Cm	CURIUM	Bk	BERKÉLIUM	Cf	CALIFORNIUM	Es	EINSTEINIUM	Fm	FERMIUM	Md	MENDELÉVIUM	No	NOBÉLIUM	Lr	LAWRENCEUM

(1) Pure Appl. Chem., 73, No. 4, 667-683 (2001)

La masse atomique relative est donnée avec cinq chiffres significatifs. Pour les éléments qui n'ont pas de nucléides stables, la valeur entre parenthèses indique le nombre de masse de l'isotope de l'élément ayant la durée de vie la plus grande.

Toutefois, pour les trois éléments Th, Pa et U qui ont une composition isotopique terrestre connue, une masse atomique est indiquée.

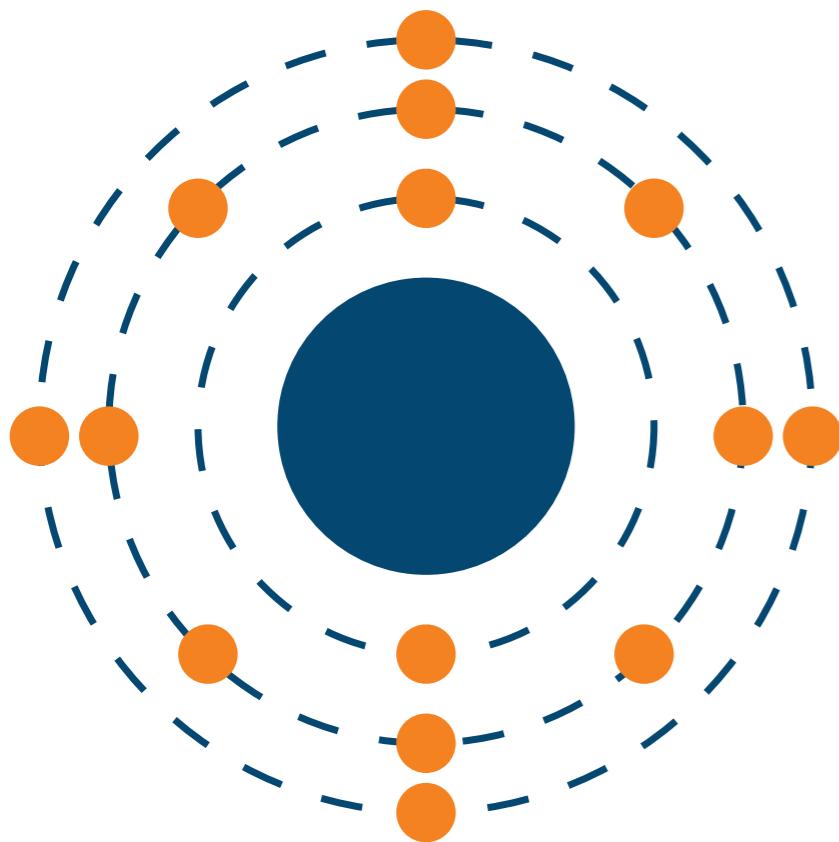




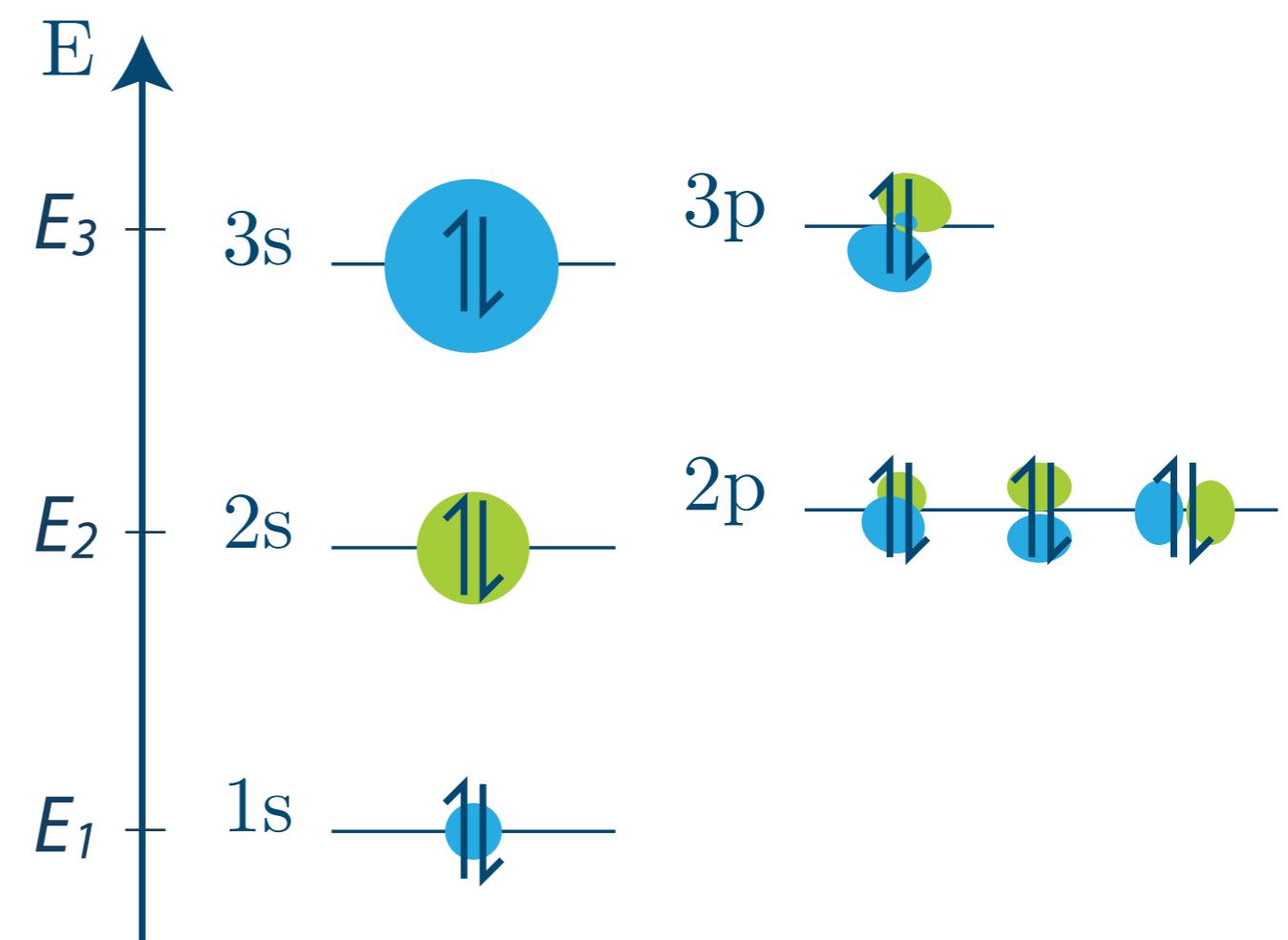
5. Remplissage électronique

Exemple pour l'atome de silicium ${}_{14}\text{Si}$:

- 3 orbites
- 4 électrons de valence
- Remplissage en tenant compte du spin :



	NUMÉRO DU GROUPE
	IV A
	NOMBRE ATOMIQUE
	14
	MASSE ATOMIQUE RELATIVE
	28.086
	SYMBOLE
	Si
	NOM DE L'ÉLÉMENT
	SILICIUM





Constantes fondamentales

Constantes fondamentales

- Masse de l'électron : $m = 9,109 \times 10^{-31} \text{ kg}$
- Charge de l'électron : $e = 1,602\,176\,10^{-19} \text{ C}$
- Constante de Boltzman : $k_B = 1,380\,650\,10^{-23} \text{ m}^2 \text{ kg s}^{-2} \text{ K}^{-1}$
- Constante de Planck : $h = 6,626\,068\,10^{-34} \text{ m}^2 \text{ kg s}^{-1}$
- Constante de Planck réduite : $\hbar = 1,054\,571\,10^{-34} \text{ m}^2 \text{ kg s}^{-1}$
- Perméabilité magnétique du vide : $\mu_0 = 4\pi 10^{-7} \text{ kg m A}^{-2} \text{ s}^{-2}$
- Permittivité diélectrique du vide : $\epsilon_0 = 10^{-9} / (36\pi) \text{ kg}^{-1} \text{ m}^{-3} \text{ A}^2 \text{ s}^4$
- Vitesse de la lumière dans le vide : $c = 299\,792\,458 \text{ m s}^{-1}$
- ElectronVolt : $1 \text{ eV} = 1,602\,176\,10^{-19} \text{ J}$

