Résumé du Chapitre 3 : L'Atome Quantique

Ce chapitre introduit le modèle quantique de l'atome, qui surmonte les limitations du modèle de Bohr.

I. Introduction : Limites du Modèle de Bohr

Le modèle de Bohr, bien que révolutionnaire, ne pouvait pas expliquer les spectres des atomes polyélectroniques, la quantification des niveaux d'énergie par un seul nombre entier, la dégénérescence des niveaux d'énergie, ni l'existence de sous-couches. Il ne tenait pas compte des intéractions électron-électron ni du mouvement du noyau.

II. Dualité Onde-Corpuscule

- **De Broglie (1924) :** Propose que toute particule en mouvement est associée à une onde, dont la longueur d'onde est $\lambda = h/p = h/(mv)$, où p est la quantité de mouvement et m la masse. Cette dualité s'applique à l'électron, ce qui explique la quantification des orbites de Bohr.
- Condition de stabilité (Bohr revisitée) : L'orbite de l'électron est stable si sa circonférence est un multiple entier de la longueur d'onde de De Broglie $(2\pi r = n\lambda)$.

III. Principe d'Incertitude d'Heisenberg (1927)

Il est impossible de connaître simultanément et avec précision la position et la quantité de mouvement (et donc la vitesse) d'une particule : $\Delta x \cdot \Delta p_x \ge h/(4\pi)$ ou $\Delta x \cdot \Delta (mv_x) \ge h/(4\pi)$. Ce principe invalide la notion classique d'orbite précisément définie.

IV. Équation de Schrödinger

- Développée par Erwin Schrödinger en 1926.
- L'atome est décrit par une fonction d'onde $\Psi(x, y, z, t)$ qui donne la probabilité de présence de l'électron dans une région de l'espace.
- Équation de Schrödinger indépendante du temps : $\hat{H}\Psi = E\Psi$, où \hat{H} est l'opérateur Hamiltonien (énergie totale).
- Solution pour l'atome d'hydrogène : La résolution de cette équation pour l'hydrogène nécessite l'introduction de trois nombres quantiques entiers (n, l, m_l) , qui décrivent l'état de l'électron.

V. Nombres Quantiques

Ces nombres quantiques résultent de la résolution de l'équation de Schrödinger et définissent les propriétés d'un électron dans un atome.

1. Nombre Quantique Principal (n):

- Décrit l'énergie de l'électron et la taille de l'orbitale (couche).
- $-n \in \mathbb{N}^* \ (n \ge 1).$
- Plus n est grand, plus l'énergie est élevée et plus l'orbitale est grande.
- Formule d'énergie pour l'hydrogène : $E_n = -\frac{\mu Z^2 e^4}{8\epsilon_0^2 h^2 n^2}$ où μ est la masse réduite

2. Nombre Quantique Azimutal (ou Secondaire, l):

- Décrit la forme de l'orbitale et le moment cinétique orbital de l'électron.
- $-l \in \mathbb{N}, 0 \le l \le n-1.$
- Notation des sous-couches (orbitales) : $l=0 \rightarrow s, \ l=1 \rightarrow p, \ l=2 \rightarrow d, \ l=3 \rightarrow f.$

3. Nombre Quantique Magnétique (m_l) :

- Décrit l'orientation de l'orbitale dans l'espace.
- $-m_l \in \mathbb{Z}, -l \leq m_l \leq +l.$
- Pour une valeur de l, il y a (2l+1) valeurs de m_l , correspondant à (2l+1) orbitales dégénérées en énergie (en l'absence de champ magnétique).

4. Nombre Quantique de Spin (m_s) :

- Introduit par Uhlenbeck et Goudsmit (1925) pour expliquer les raies fines des spectres.
- Décrit le spin propre de l'électron.
- $-m_s = \pm \frac{1}{2}$.
- Chaque orbitale peut contenir au maximum deux électrons de spins opposés.

VI. Orbitales Atomiques

- Les orbitales atomiques sont des fonctions d'onde Ψ_{nlm_l} qui décrivent l'état d'un électron (une "case quantique").
- Elles ne représentent pas des trajectoires, mais des régions de l'espace où la probabilité de trouver l'électron est élevée ($|\Psi|^2$).
- Nœuds : Régions où la probabilité de présence est nulle.
 - Nœuds radiaux : n l 1.
 - Nœuds angulaires : l.
 - Nombre total de nœuds : n-1.

Fiche de Révisions : L'Atome Quantique

- **Limites de Bohr :** Ne pas expliquer les polyélectroniques, sous-couches, dégénérescence, ni intéractions.
- Dualité Onde-Corpuscule (De Broglie) : Particule = onde. $\lambda = h/p$. Explique quantification des orbites de Bohr $(2\pi r = n\lambda)$.
- Principe d'Incertitude d'Heisenberg : Impossible connaître position ET quantité de mouvement simultanément $(\Delta x \cdot \Delta p_x \geq h/(4\pi))$. Adieu les orbites précises!
- Équation de Schrödinger : $\hat{H}\Psi = E\Psi$.
 - Ψ : fonction d'onde, probabilité de présence de l'électron ($|\Psi|^2$).
 - Résolution \rightarrow Nombres Quantiques.

Nombres Quantiques (définissent l'état d'un électron) :

- 1. **Principal** (n) : Énergie et taille de l'orbitale (couche). $n \ge 1$. $E_n \propto -1/n^2$ (pour H).
- 2. **Azimutal** (*l*): Forme de l'orbitale (sous-couche) et moment cinétique orbital. $0 \le l \le n-1$. l=0(s), l=1(p), l=2(d), l=3(f).
- 3. Magnétique (m_l) : Orientation de l'orbitale. $-l \le m_l \le +l$. (2l+1) orbitales par sous-couche.
- 4. **Spin** (m_s) : Spin propre de l'électron. $m_s = \pm \frac{1}{2}$. Max 2 électrons par orbitale (spins opposés).

Orbitales Atomiques (Ψ_{nlm_l}) :

- Régions de l'espace où la probabilité de trouver l'électron est élevée.
- Ne sont PAS des trajectoires.
- Nœuds : Régions de probabilité nulle.
 - Radiaux : n l 1.
 - Angulaires : l.
 - Total : n-1.