

Titre : LP18 Modèle de l'atome

Présentée par : Sallé Lucie

Rapport écrit par : Meyre- -Baqué Izia

Correcteur : Yzombard Pauline

Date : 29/03/2021

Bibliographie		
Titre	Auteurs	Éditeur
Physique Moderne	De Boeck	
Quantique fondements et applications	Perez	
Physique atomique Tome 1 et 2	Cagnac	

Plan détaillé

(indiquer parties, sous-parties, 1 ou 2 phrases d'explications par sous-partie, et références)

Niveau choisi pour la leçon : Licence

Pré-requis :

- Mécanique du point
- Equation de Schrodinger
- Spin
- Moment cinétique
- Remplissage électronique (chimie)

Introduction : Atome vient du grec atomos : insécable : longtemps considéré comme une brique élémentaire de la matière. Enjeu : expliquer les transformations chimiques. 118 éléments dans le tableau périodique, connus à ce jour.

On s'intéresse aux modèles qui se sont succédés. Dans un premier temps les modèles classiques/semi-classiques jusqu'au début du 20ème siècle puis au modèle quantique.

On se place avec des atomes de noyaux X avec A nombre de masse et Z protons ODG $10^{-10}m$

I- Découverte de l'atome et modèles classiques, semi-classique

1) De l'antiquité jusqu'au modèle semi-classique

Postulat de l'existence de l'atome depuis l'antiquité, mais en 1897 Thomson découvre l'électron : électrons circulant dans une soupe positive de matière.

Découverte par Rutherford en 1911 du noyau : a envoyé des particules alpha sur une feuille d'or : si on utilise le modèle de Thomson les particules sont censées traverser la feuille mais en réalité une partie est déviée : ce qui a pour conséquence de postuler l'existence d'une masse positive centrée dans l'atome et qui constitue la majeure partie de la masse de l'atome, de taille très petite devant celle de l'atome. Le reste de l'atome est constitué principalement de vide : car une majorité des particules passent. Ce modèle est le modèle planétaire de l'atome.

2) Modèle de Bohr (1913)

Prix Nobel en 1922.

On se place dans la suite de notre leçon, dans le cadre de l'atome d'hydrogène. Si on reprend le modèle de l'atome planétaire de Rutherford : l'électron en orbite autour du noyau mais le souci est que l'électron rayonne donc s'il rayonne il s'écrase sur le noyau (limite du modèle planétaire).

Bohr fait donc deux hypothèses ad-hoc :

Hypothèses :

- Electron en orbite circulaire fixe.
- Le moment cinétique est quantifié avec n entier positif : $L = n\hbar$

Démonstration de la quantification du rayon atomique :

Système : électron + noyau \rightarrow PFD à l'électron dans un référentiel galiléen.

$$mv^2/r = -e^2/4\pi\epsilon_0 r^2$$

Quantification du moment cinétique : $L = mvr = n\hbar$

On combine ces deux résultats : on en déduit la relation $v^2 = n^2\hbar^2/mr^2$: donc les vitesses sont quantifiées et les rayons sont quantifiés (on ajoute l'indice n sur v et r). On déduit l'expression rn du rayon atomique. On définit le rayon de Bohr : $r_n = a_0 n^2$: a_0 rayon de Bohr de valeur 0,53 pm.

\rightarrow Quantification du rayon atomique

Calcul de l'énergie : $E = E_c + E_p = -e^2/8\pi\epsilon_0 r^2$: donc comme le rayon est quantifié, l'énergie le sera aussi. On introduit une nouvelle constante $E = -E_0/n^2$ où E_0 est l'énergie de première ionisation et vaut 13,6 eV. Donc, dans ce modèle, on en déduit que les énergies d'orbites de l'électron sont quantifiées avec comme valeur : $E_n = -13,6/n^2$ en eV. L'atome ne peut exister que dans des états stationnaires associés à des énergies bien définies.

3) Conséquences et limites du modèle

Première idée de Bohr : expliquer les raies d'émission et d'absorption de l'hydrogène : slide des spectres atomiques.

Schéma : noyau + orbites circulaires ($n=1, n=2\dots$). Quand un électron passe d'un niveau excité à un niveau inférieur un rayonnement est émis de fréquence liée à la différence d'énergie entre les deux niveaux : $\Delta E = h\nu$

On exprime cette différence d'énergie pour passer du niveau u à l : $1/\lambda = (E_u - E_l)/hc$: on fait apparaître la constante de Rydberg qui était prévue par l'expérimentation. Constante de Rydberg $R = 1,097.10^7 \text{ m}^{-1}$

Slide : Séries pour l'hydrogène. Modèle de Bohr peut expliquer ces séries pour l'atome d'hydrogène et les hydrogénoïdes.

Limites : -niveaux pas toujours vérifiés pour les autres atomes, il y a de la dégénérescence des niveaux en énergie qui ne peuvent être expliqués que par la quantique. Le modèle de Bohr marche (étonnement) bien pour l'hydrogène, mais dès que l'on veut passer à deux électrons (ou plus), celui-ci ne marche plus.

II- Modèle quantique de l'atome d'hydrogène

1) Equation de Schrodinger

$V(r)$ potentiel électrostatique

Equation de Schrodinger stationnaire à trois dimensions (on rappelle sa forme en coordonnées sphériques avec une slide) : on divise par la fonction d'onde solution que l'on cherche.

Problème à symétrie sphérique donc on passe en coordonnées sphériques : slide avec l'équation complète. On cherche les fonctions d'ondes de l'électron.

Séparation des variables : $\psi = R(r)f(\theta)g(\phi)$: on injecte dans l'expression de l'équation de Schrodinger et on multiplie par $r^2 \sin(\theta)^2$ et on divise par Rfg .

The image shows a handwritten derivation of the Schrodinger equation in spherical coordinates. The steps are as follows:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) \psi = 0$$

$$\frac{\sin^2 \theta}{R} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) = \frac{2m}{\hbar^2} r^2 \sin^2 \theta (E - V)$$

$$-\frac{\sin \theta}{f} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial f}{\partial \theta} \right) - \frac{\partial^2 g}{\partial \phi^2} \times \frac{1}{g}$$

$$-\frac{d^2 g}{d\phi^2} = g \times A$$

At the bottom, it is noted: $-m_e c^2 = n b_{\text{quantique}}$

Cette dernière équation s'appelle l'équation azimutale : on peut facilement la résoudre : $g(\phi) = \exp(im\phi)$. Si on fait la même chose pour R et pour f on obtient des équations plus difficiles à résoudre : slide avec les équations (et les constantes introduites m_l et $l(l+1)$)

Piste de réflexion pour les résoudre : $R(r) = A \exp(-r/a_0)$.

On a fait apparaître des nombres quantiques.

2) Introduction aux nombres quantiques

Slide : solutions radiales et les harmoniques sphériques f^*g . Pour différents nombres quantiques n, l, m_l : n nombre quantique principal (c'est le même n qu'on avait avec Bohr et il vient de l'équation radial) n entier naturel, l : nombre quantique orbital (lié au moment cinétique L : donner les valeurs propres) entre 0 et $n-1$, m_l nombre quantique magnétique traduit la nécessité d'explicité la direction du moment orbital L) entre $-l$ et $+l$.

3) Spin et structure de l'atome

Conclusion de Stern et Gerlach ont permis de prouver l'existence d'un moment cinétique intrinsèque/spin dans les années 1920. Ça vient compléter la théorie qu'on vient de voir

On introduit un nouveau nombre quantique : $S = \frac{1}{2}$ pour l'électron et $m_s = \pm 1/2$. On a $2s+1$ valeurs possibles.

Pour l'atome d'hydrogène, l'énergie ne dépend que de n : on aura des niveaux dégénérés :

Graphique : dessiner les premiers niveaux d'énergie.

Et slide : représentation des orbitales atomiques.

III- Atomes à plusieurs électrons, protons

Idée : se servir du principe d'exclusion de Pauli : on aura des dégénérescences en énergie et effectuer un remplissage électronique en énergie croissantes et en déduire des propriétés physiques et chimiques

Conclusion : grandes expériences qui ont permis d'affiner le modèle de l'atome. Difficile à étudier car problème à N corps : beaucoup d'hypothèses doivent être faites. Étude des noyaux constitue également un gros bloc qu'on pourra aborder dans une prochaine leçon

Questions posées par l'enseignant (avec réponses)

(l'étudiant liste les questions posées, ainsi que les réponses données par l'enseignant. Si certaines réponses manquent, l'enseignant pourra compléter le document)

- Parler du modèle de Thomson et pourquoi Rutherford contredit ce modèle : justifier en parlant de l'expérience de Rutherford => le modèle de « plum pudding » de Thomson prédisait une matière « uniforme » positive, donc les noyaux alpha n'auraient jamais pu être réfléchis en arrière (par collision sur le noyau).
- Définir une particule alpha : hélium 4
- A l'époque on savait ce que c'était un proton ? non
- Pourquoi le modèle de Rutherford est appelé modèle planétaire ? <= dans la leçon, expliquer rapidement les terminologies utilisées.
- Taille et masse de l'électron ? : <= dans le modèle standard, l'électron est une particule « point ». (attention donc aux mots choisis dans la leçon, quand on parle d' « électrons plus petits que le noyau »). Discussion sur la localisation et la fonction d'onde d'un électron.
- Qu'est-ce qu'a fait Planck ? : déduit la quantification du rayonnement provenant du corps noir. Pourquoi le rayonnement du corps noir doit être quantifié ? courbe obtenue avec les quanta d'énergie sinon ça diverge
- Electron volt ça représente quoi physiquement ? énergie qu'acquiert un électron si on lui applique 1 volt.
- En quoi le problème de l'électron qui s'écrase est résolu avec Bohr ? c'est une hypothèse forte du modèle => c'est un postulat, les orbites sont fixes (quantifiées), postulat ad-hoc.
- Le modèle de Thomson (et donc, celui de l'électron élastiquement lié) ne permet pas d'expliquer les spectres d'émission, mais je croyais que cela expliquait bien le rayonnement dipolaire et donc l'absorption d'un rayonnement EM. Qu'est-ce qui ne va pas dans ce modèle ? Il n'explique pas l'émission (juste l'absorption quand la lumière est en résonance avec le dipole induit). Et on n'a aucune quantification considérée.
- Pourquoi Bohr marche bien pour les hydrogénoïdes ? il y a des symétries qui fait que les niveaux quantiques sont dégénérés. (besoin de moins de nombres quantiques pour décrire les énergies internes).
- Quelle hypothèse fait-on dans le modèle quantique ? l'électron est décrit pas une fonction d'onde il n'est plus localisé.
- Expérience pour mettre en lumière que la matière peut aussi être une onde ? De Broglie, fente d'Young. Quelle est l'expérience qui a montré que la lumière était aussi un corpuscule ? arracher un électron ou non selon la fréquence du rayonnement envoyé : photoélectrique => effet de 'marche'/'saut' du signal, dépendant de la fréquence du rayonnement.
- Nombre quantique principal, c'est quoi la signification physique ? les énergies des niveaux

- Effet Zeeman anormal / Stern Gerlach? Stern Gerlach : un faisceau d'atomes d'argent dévié par un champ magnétique inhomogène alors qu'ils ne devraient pas car pas de moment cinétique. Effet Zeeman anormal : levée de dégénérescence en énergie en un nombre inhabituel de niveaux : on en voit 2 au lieu de 3 comme on s'attendait à l'époque. Ddonc on introduit le spin.
- Autres particules qui ont un spin différent de l'électron ? boson spin entier. Est-ce qu'un atome peut être un boson/fermion ? oui
- La mécanique quantique c'est valide jusqu'à quelle taille ? => calculer la longueur d'onde de De Broglie h/mv : effet quantique observable si taille des objets proches de cette valeur : <= peut-on donner des ordres de grandeur ? application à un téléphone ou à un neutron ?
- Revenir sur les fonctions radiales et les graphes de probabilité de présence. On peut comparer avec le modèle planétaire ? l'électron n'est pas localisé . On définit l'orbitale atomique, comme la zone où l'électron a une proba à 95% de présence. Pour les niveaux nS : Les orbitales recouvrent le noyau alors que les orbites du modèle planétaire ne touchent jamais le noyau ! Est-ce qu'il existe des orbitales qui ressemblent au modèle planétaire ? niveaux de Rydberg (i.e haute énergie), circulaire
- Une Limite/erreur du modèle de Bohr ? pour les niveaux nS ($l=0$), la particule est aussi localisée au niveau du noyau et pas à une distance définie comme prédit par le modèle de Bohr.
- Pourquoi « on connaît Pauli », comme dit dans la leçon ? on sait quoi ? principe d'exclusion de Pauli : deux fermions ne peuvent pas occuper le même état.
- Born Sommerfeld ? => introduit pour expliquer la structure fine des raies de Balmer de l'hydrogène observées => orbite elliptique => introduction du nombre quantique L. Ne marche que pour l'hydrogène ou les hydrogénoïdes (1 seul électron)
- Quelle est la propriété importante pour que les énergies soient quantifiées ? il faut confinement de la particule (!!) <= à dire pendant la leçon.
- Expliquer le principe du microscope à effet Tunnel ? échantillon + pointe : barrière de potentiel liée à la structure de l'échantillon à passer. Si l'échantillon est assez proche les électrons peuvent passer cette barrière : on asservi en courant qui passe, et donc on lit l'altitude de la pointe, pour avoir le relief de l'échantillon scanné.

Commentaires lors de la correction de la leçon

(l'étudiant note les commentaires relatifs au contenu de la leçon : niveau, sujets abordés, enchaînement, réponses aux questions, etc. L'enseignant relit, et rectifie si besoin)

- Insister sur les limites des modèles, ce qui permet de justifier le développement du nouveau modèle. Par exemple : De Rutherford à Bohr => expliquer pourquoi l'électron ne s'écrase pas avec les nouvelles hypothèses du modèle de Bohr.

- Conclure chaque partie, permet de lier au mieux les différentes sections. Par exemple : transition possible : Bohr ne marche que pour l'hydrogène donc on va vers la mécanique quantique

Important :

- Pour le modèle quantique : introduire l'idée révolutionnaire : l'électron est décrit par une onde !! \Rightarrow cadre ondulatoire de la matière, rappeler la longueur d'onde de Broglie.
- Remarques :
 - On ne peut pas expliquer les raies doubles de l'hydrogène avec ce modèle de Bohr, il faut Sommerfeld
 - Taille de l'électron : une particule « point » d'où le fait qu'on le décrit par une fonction d'onde.
 - Introduire le nombre n : en disant que ce sont les niveaux d'énergies, l c'est le moment orbital (ça vient de Sommerfeld orbites elliptiques), m_l c'est la projection
- A voir si on garde le rayon de Bohr ou choisir de rentrer dans les détails de l'équation 3D en sphérique. Vu le temps restreint de l'exercice, il faut sûrement choisir. Le calcul en sphérique 3D est assez périlleux avec le stress et la contrainte du temps. Peut être peut on se limiter à montrer sur les slides les étapes du calcul (idée de trouver une solution générale de la fonction d'onde en utilisant la séparation des variables).
- Pas forcément besoin de faire la partie 3 annoncée dans le plan (et qui n'a pas pu être traitée par manque de temps). Il faut faire des choix, et vu le programme déjà bien chargé, vouloir traiter du remplissage des couches électroniques semblent assez ambitieux.

Partie réservée au correcteur

Avis général sur la leçon (plan, contenu, etc.) :

Plan ambitieux, il y a beaucoup de choses à dire sur le sujet, et l'étudiante a réussi à tirer un portrait global de l'évolution historique du modèle de l'atome, se focalisant sur l'hydrogène, après avoir donné les grandes lignes des expériences historiques qui ont amené à développer des nouveaux modèles. C'est bien et je pense que c'était vraiment ce que le titre de la leçon « les modèles » appelle à faire.

Dans les petits bémols : Il faut soigner ses conclusions et transitions/motivations pour introduire le modèle suivant. Sinon, on risque de tomber dans le travers de dresser une liste de modèles successifs, sans bien mettre en lumière pourquoi le nouveau modèle vient compléter le modèle précédent.

Attention aux temps et au rythme de la dictée.

Notions fondamentales à aborder, secondaires, délicates :

Notion fondamentale : expliquer l'idée révolutionnaire de la quantification de l'atome : l'électron est une particule mais est aussi une onde ! Et on traite l'évolution de la fonction d'onde de l'électron de l'atome, dans l'équation de Schrödinger.

⇒ C'est l'analogie avec la lumière, qui est une onde et a un caractère corpusculaire, qui a fait poser à de Broglie, cette notion de comportement ondulatoire de la matière.

⇒

Notion fondamentale : quantification de l'énergie \Leftarrow vient du confinement !! L'énergie d'un électron libre, n'est pas quantifiée (et on peut très bien décrire par fonction d'onde l'électron libre \Rightarrow cf étude de la réflexion ou la transmission d'un électron arrivant à une barrière de potentielle).

Notion secondaire : pour la transition vers le modèle quantique : le modèle de Bohr Sommerfield, avec les orbites elliptiques, pour expliquer la structure fine (les doubles raies) du spectre de Balmer de l'hydrogène. Mais malgré les efforts de deux physiciens, impossibilité d'appliquer le modèle semi-classique à un atome avec plus d'un électron (même pour l'Helium, ça ne marche plus !).

Comment Bohr a eu l'idée d'une quantification des énergies : \Rightarrow en plus de l'observation des spectres d'émission, des travaux de Planck sur le corps noir aussi impliqué une quantification de l'énergie interne \Rightarrow sinon, la densité d'énergie du corps noir divergerait.

Expériences possibles (en particulier pour l'agrégation docteur) :

Dans le temps imparti, il me semble compliqué de faire une expérience. Par contre, une slide ou une petite vidéo d'une minute, pour montrer une application concrète de la quantification des énergies atomes \Rightarrow comme le microscope à effet tunnel, ou la spectroscopie (ce qui a été fait avec les spectres de raies d'absorption de deux éléments montrés en slide), cela peut être appréciable.

Typiquement ici, montrer (comme cela a été fait), les harmoniques sphériques, et passer 30 secondes à expliquer ce qu'elles ont de nouveau par rapport à la représentation naïve du modèle quantifier de l'atome de Bohr (pas fait) : l'électron n'est pas localisé ! et peut aller « dans » le noyau pour les orbitales S !!. Ce genre d'exploitations de ressources disponibles sur le net, amène déjà beaucoup à la leçon.

Ou l'expérience de Stern Gerlach ?

https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/9/9e/Quantum_spin_and_the_Stern-Gerlach_experiment.ogv

Bibliographie conseillée : Le Bellac peut être ? Bien que j'ai trouvé le tome 1 du Cagnac très adapté pour l'avancée historique de la construction des différents modèles de l'hydrogène.