

Modèles de l'atome

Table des matières

Objectifs de la leçon	1
Introduction	1
1 Modèles classiques de l'atome	1
1.1 Brève histoire de la notion d'atome	1
1.2 Modèle planétaire de l'atome (Perrin et Rutherford)	1
1.3 Instabilité électrodynamique de l'atome	2
2 Modèle de Bohr	2
2.1 Hypothèses du modèle	2
2.2 Orbites stationnaires de Bohr	2
3 L'atome d'hydrogène	2
3.1 Hamiltonien dans un potentiel central	2
3.2 Cas de l'atome d'hydrogène	3
3.3 Ouverture sur les atomes hydrogénoïdes	3
4 Ouverture, prolongement et conclusion	3
Expériences réalisées et animation	3
Choix pédagogiques	4
Bibliographie	4
Questions et remarque	4

Attention j'ai probablement écrit Thompson avec un p à plusieurs endroits, mais c'est de Tomson sans p dont je parle.

Objectifs de la leçon

L'objectif de cette leçon est de montrer l'évolution des modèles de l'atome au cours du temps et notamment leur évolution vis à vis des résultats expérimentaux, ce qui a permis d'aboutir au modèle de l'atome d'hydrogène et à l'étude orbitale des noyaux très utile en physique atomique et moléculaire ainsi qu'en chimie.

Niveau : L3

Prérequis :

- mécanique du point, forces centrales
- électromagnétisme et champ coulombien
- bases de la mécanique quantique, équation de Schrödinger, hamiltonien
- moment cinétique, harmoniques sphériques

Introduction

Aujourd'hui l'atome et ses propriétés, notamment son rôle dans les propriétés chimiques des espèces, son bien connus, mais ça n'a pas toujours été le cas et de nombreux points de vue et modèles de l'atome se sont succédés, c'est ce à quoi nous allons nous intéresser dans cette leçon.

1 Modèles classiques de l'atome

1.1 Brève histoire de la notion d'atome

- définition à partir du mot grec "atomos" pour insécable
- premier modèle atomique à base scientifique : modèle de Dalton (1803 - 1807) (Wikipédia)
- découverte de l'électron par Thompson (1897) (Aslangul I p.9)
- modèle atomique de Thompson (1903)

Peu avant le modèle de Thompson, Perrin avait introduit un modèle planétaire de l'atome qui a été pendant un premier temps écarté au profit de celui de Thompson.

1.2 Modèle planétaire de l'atome (Perrin et Rutherford)

- expériences de Geiger et Marsden (1910) puis de Rutherford (1911 - 1913) montrent le caractère lacunaire de l'atome (Aslangul I p. 55)

→ modèle de Thompson écarté, modèle planétaire accepté, structure lacunaire avec masse concentrée dans le noyau

1.3 Instabilité électrodynamique de l'atome

(Aslangul I p.20)

Je l'ai présentée beaucoup plus rapidement pendant mon oral blanc mais il peut être intéressant de développer cette partie (cf remarques à la fin).

- l'électron accéléré rayonne, il perd donc de l'énergie car dans le modèle \vec{v} n'est pas constante
- selon les modèles classiques, l'électron devrait s'écraser sur le noyau
- ODG durée de vie de l'atome très faible, problème des modèles classiques!!!

2 Modèle de Bohr

(Aslangul p.160)

2.1 Hypothèses du modèle

- limites du modèle planétaire
- l'électron possède une orbite circulaire stable
- transition entre les orbites si absorption ou émission de photon d'énergie $h\nu$ (spectre de raies)
- quantification du moment cinétique $L = n\hbar$, $n \geq 1$.

2.2 Orbites stationnaires de Bohr

- PFD sur un électron soumis à la force de Coulomb exercée par un noyau de charge Ze
- PFD et quantification du moment cinétique donne quantification du rayon des orbites
- on en déduit la quantification des énergies et donc le spectre
- comparaison du spectre avec les résultats expérimentaux

3 L'atome d'hydrogène

(Badevant et Dalibard, Mécanique Quantique, p.219)

3.1 Hamiltonien dans un potentiel central

(p.222)

- hamiltonien obtenu à partir de l'énergie cinétique et du potentiel dans le cas d'un mouvement à potentiel central, c'est une réduction du problème à deux corps en ne considérant que le mouvement de l'électron (noyau fixe)
- exprime le laplacien en coordonnées sphérique avec l'opérateur moment cinétique au carré.

- le hamiltonien commute avec le moment cinétique et donc avec \hat{L}^2 et \hat{L}_z .
- on a alors une base de fonctions propres commune à \hat{H} , \hat{L}^2 et \hat{L}_z
- une base de fonctions propres commune à \hat{L}^2 et \hat{L}_z est la base des harmoniques sphériques (cf p.209), on peut alors séparer les variables, chaque fonction propre s'exprime comme le produit d'une fonction radiale et d'une harmonique sphérique.

3.2 Cas de l'atome d'hydrogène

(p.227)

- on néglige le spin de l'électron, le problème se réduit à celui d'une particule de masse m_e placée dans le potentiel coulombien du proton supposé infiniment lourd
- on obtient alors l'équation stationnaire à laquelle obéit la partie radiale
- on adimensionne cette équation à l'aide du rayon de Bohr et de l'énergie d'ionisation de l'atome d'hydrogène
- la résolution de cette équation permet de retrouver les niveaux d'énergie du modèle de Bohr tout en obtenant la dégénérescence des niveaux énergétique.
- les harmoniques sphériques renseignent sur la probabilité de présence de l'électron au sein d'une orbitale de rayon r , on obtient aussi la densité de probabilité radiale de présence à partir de la partie radiale de la fonction d'onde.

3.3 Ouverture sur les atomes hydrogénoïdes

- concerne les atomes à Z protons et ionisés $Z - 1$ fois
- on obtient des résultats similaires en adaptant le potentiel coulombien à celui d'un noyau de charge $+Z$.

4 Ouverture, prolongement et conclusion

Nous avons vu dans cette leçon que si la notion d'atome a été adoptée il y a bien longtemps c'est une mauvaise définition qui a été retenue pendant longtemps. Ce sont de relativement récentes expériences qui ont permis de montrer que l'atome est lui-même constitué de "briques" plus élémentaires et donc de réaliser des modèles plus fins de l'atome. On s'est restreint ici à l'atome d'hydrogène et aux atomes hydrogénoïdes mais une modélisation semblable des autres atomes est possible en introduisant la notion de charge effective dans le cadre du modèle de Slater qui revient à considérer d'une part l'attraction du noyau sur les électrons et d'autre part la répulsion des électrons des couches inférieures.

Expériences réalisées et animation

Choix pédagogiques

J'ai décidé de commencer par une approche historique rapide des modèles de l'atome pour montrer que l'idée que l'on a actuellement de l'atome n'a pas toujours été la même mais que c'est bien par l'expérience qu'elle a été obtenue avec dans un premier temps la mise en évidence de l'existence de l'électron par Thompson puis la mise en évidence du caractère lacunaire de l'atome par Rutherford. Je choisis ensuite de parler du modèle de Bohr qui est le premier à introduire la quantification dans le modèle de l'atome et résout de nombreux problèmes liés aux modèles classiques, notamment les problèmes de stabilité. Je termine cette leçon par la modélisation la plus compliquée formellement puisqu'elle fait appel à des notions plus complexes de la mécanique quantique mais donne des résultats plus précis et en accord avec le modèle de Bohr.

Bibliographie

- Aslangul, Mécanique quantique I et II
- Badevant et Dalibard, Mécanique quantique

Questions et remarque

Questions

- Qu'est ce qui va changer pour les atomes polyélectroniques? -> Interaction électron-électron. Parle du modèle de Slater avec écrantage.
- Que faut-il également prendre en compte dans la construction de l'atome polyélectronique? -> Il faut mtn écrire fonction à N électrons -> il faut prendre en compte le spin et principe d'exclusion de Pauli -> Fonction d'onde antisymétrique à N électrons!
- Qu'est-ce que le spin? Moment cinétique intrinsèque de l'électron.
- Dans quel type d'observable peut-on le voir se manifester? Lors d'interaction avec un champ magnétique
- Quel expérience? Stern et Gerlach par exemple avec la déviation dans 2 sens du faisceau d'atomes d'argent par un faisceau magnétique. (attention apparemment Stern et Gerlach atome d'argent, pas électrons)
- Comment s'écrit le moment cinétique total en fonction du moment cinétique orbital et du spin? -> $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$, γ facteur de Landé
- L'argent avait été choisi car sa configuration se finit par s^1 -> $l = 0$ donc le moment cinétique total vaut juste le spin!
- Règles de construction en chimie. Comment on les interprète qualitativement? Klechkowski lié au niveau énergétique avec le modèle développé ici. Règle de Hund : les électrons préfèrent vivre sur des orbitales différentes si possible car répulsion Coulombienne entre électrons -> on la minimise.
- Dans le modèle quantique, pourquoi les quantités physiques conservées sont-elles représentées par des opérateurs qui commutent avec H? -> Vient de la relation d'Erhenfest.
- C'est quoi les pb du modèle de Bohr, ses contradictions avec la MQ? Modèle reste classique avec la notion de trajectoire -> reste l'instabilité + la quantification sort de nulle part.
- Comment pourrait-on essayer de trouver l'équivalent d'une trajectoire dans un modèle quantique

de l'atome ? Densité de probabilité radiale pour une 1s ? -> Présente un maximum au rayon de Bohr.

→ Dit "Le maximum d'énergie est atteint pour n tend vers plus l'infini" dans le modèle de Bohr, est-ce que c'est vrai ? Si reste lié seulement, il existe des états de diffusion pour des énergies supérieures

→ L'identité de $E_p = -2E_c$ vient d'où ? Viriel

→ A quoi correspondent les orbitales s,p,d,f par rapport aux harmoniques sphériques ? Construites avec des CL des harmoniques sphériques. (combine $+m$ et $-m$ pour avoir qqchose de réel).

→ Le truc que prédit pas Bohr c'est la dégénérescence

Remarques

Relativement complet, forme rien à dire, le choix de ce qui a été présenté est plutôt pas mal, on peut pas passer trop de temps sur le modèle de Thomson parce que ça serait trop perte de temps. Éventuellement couper un peu sur le modèle historique et le modèle planétaire et passer un peu plus de temps sur le modèle de Thomson. Le parti pris est pas trop mal de mettre quasiment sur un pied d'égalité Perrin et Thomson. Un peu de latitude sur la première partie pour modifier mais les 2 parties suivantes laisser comme ça.

Remarques personnelles : la leçon étant assez dense j'ai voulu aller vite au début, et au final je suis arrivé au III au bout de 23 minutes donc j'ai du temporiser pour pas faire une leçon trop courte. Si vous êtes rapides éventuellement discuter un peu plus l'instabilité de l'atome avec les modèles classiques, j'aime bien comment c'est fait dans le Aslangul, sinon discuter un peu plus du modèle de Thomson comme conseillé par le correcteur. On peut également chercher des animations pour la partie historique parce qu'elle est très longue et c'est un peu gênant à présenter sur slide uniquement. Le correcteur ne me l'a pas reproché donc je pense que c'est normal pour ce genre de leçon.