# L'atome d'hydrogène

## Description générale de l'atome

Particules : 1 proton et 1 électron

→ Interactions possibles ?
→ Energie ?

## Description quantique

La description de l’état d’une particule  se fait au moyen d’une fonction complexe $\psi \rightarrow$ **fonction d’onde**.

**Signification physique** :

# Equation de Schrödinger

Pour un système stationnaire :

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

# Utilisation des opérateurs

- L'opérateur associée à la position (x,y,z) est la multiplication par la coordonnée :

$$\hat{x} = x$$

- L'opérateur associée à la quantité de mouvement est :

$$\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$$

→ expression de l'opérateur hamiltonien dans le référentiel barycentrique

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

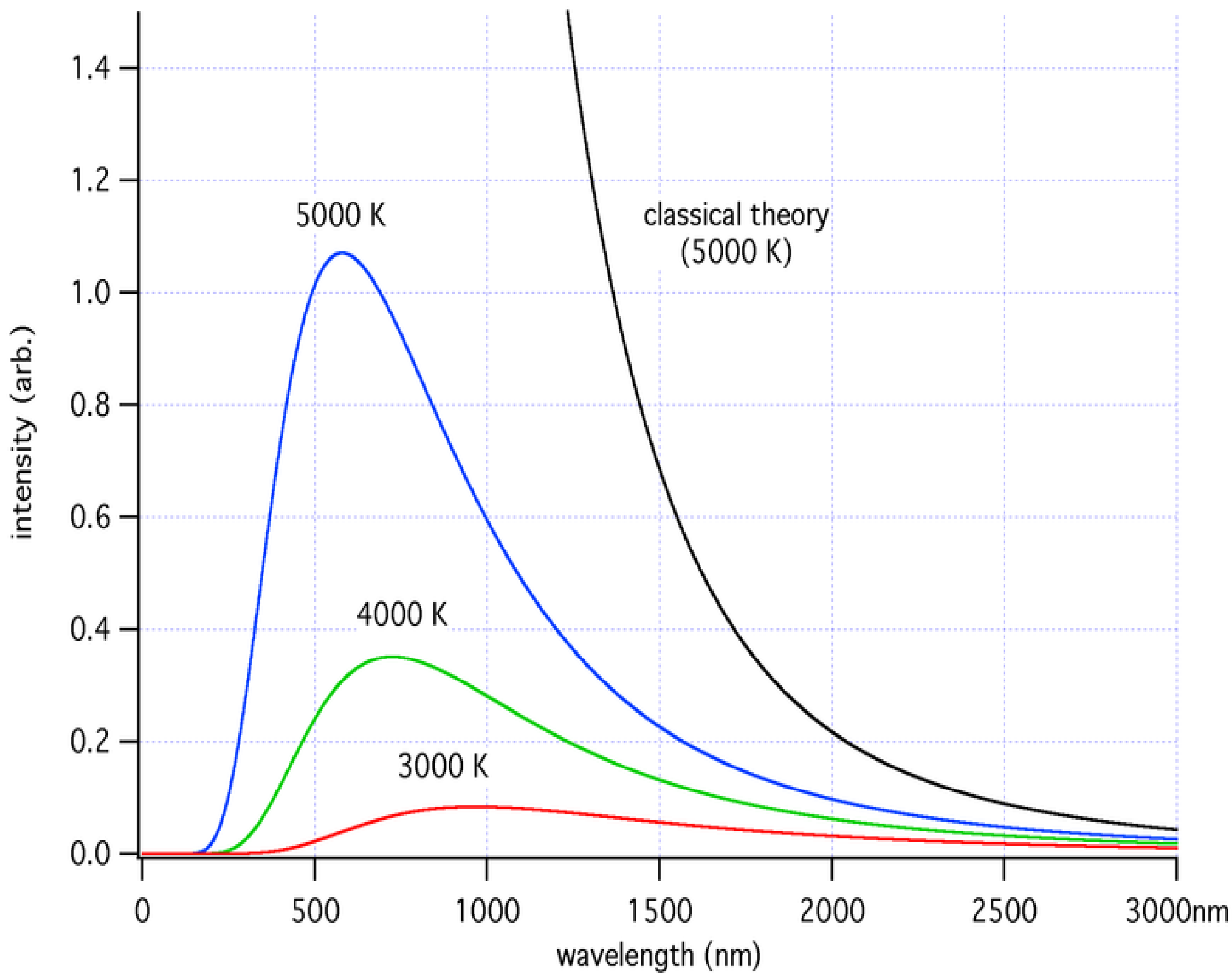
# Energie de l'atome d'hydrogène

Energie **quantifiée**

$$E_n = -\frac{13{,}6}{n^2}$$

# Rapide historique sur l'histoire de la quantification

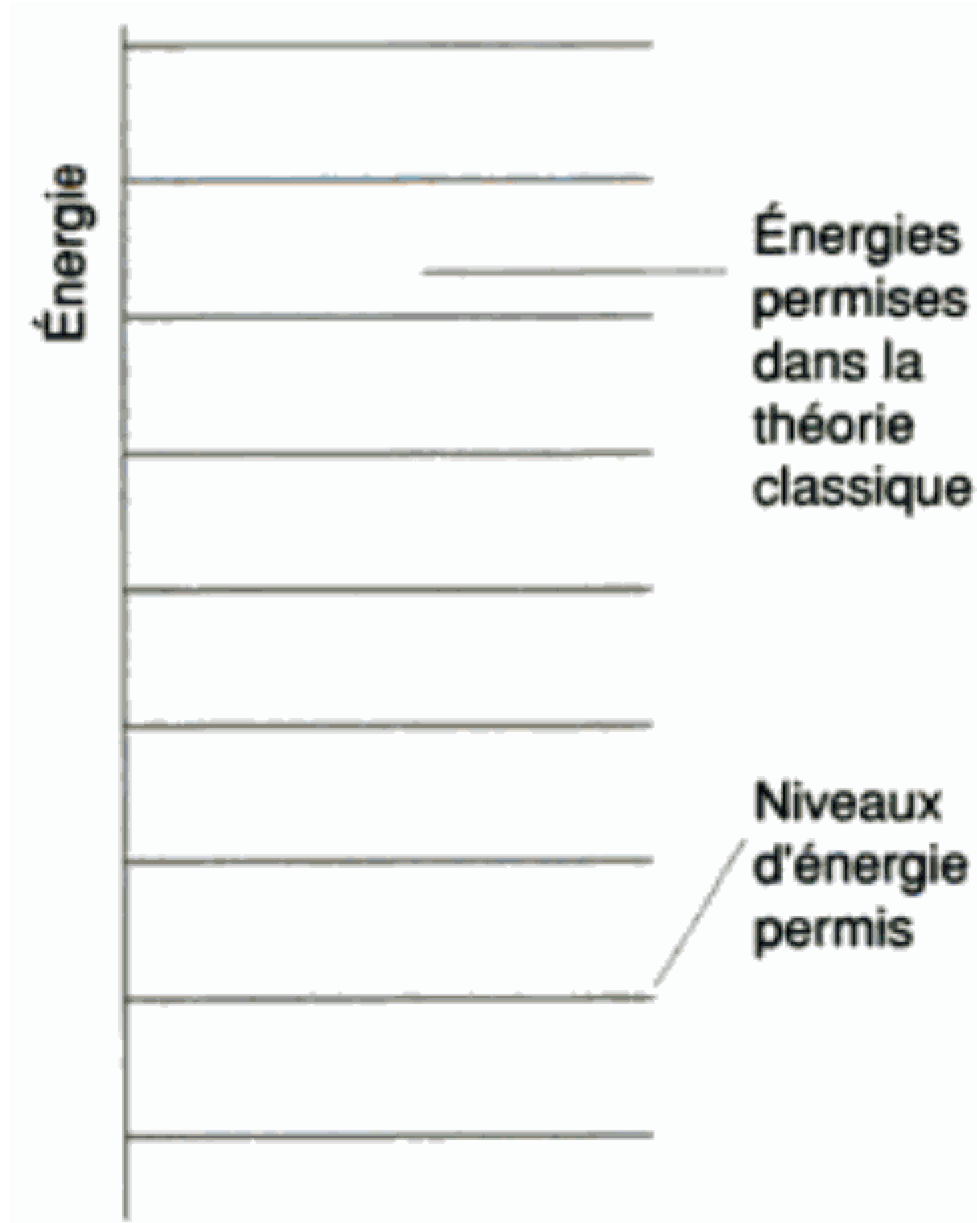
**Fin XIXème siècle** : catastrophe de l'ultraviolet




Lord Rayleigh

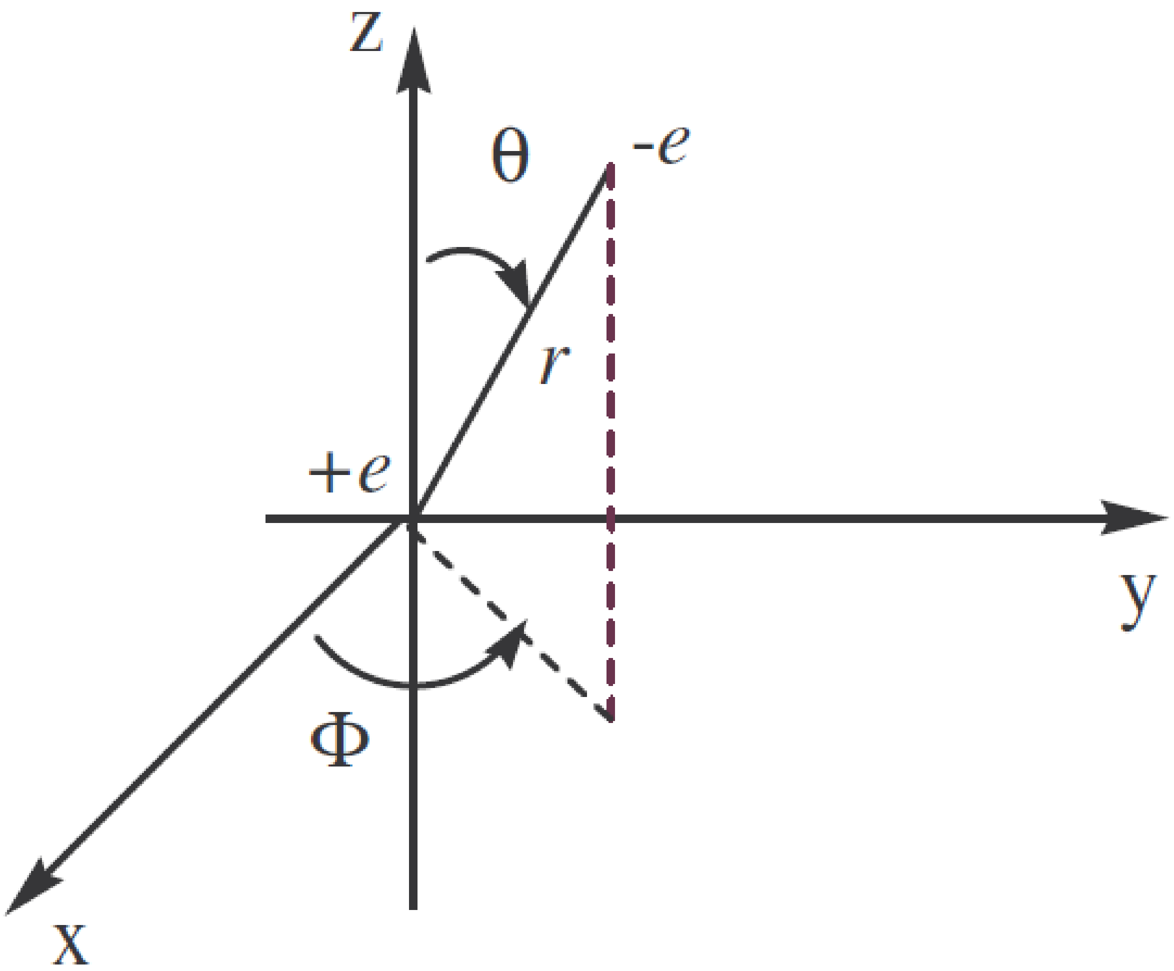
# <u>**1900**</u> : La solution de Planck

Max Planck



# Les orbitales atomiques

**Système de coordonnées** : sphériques



# Expression de la fonction d'onde

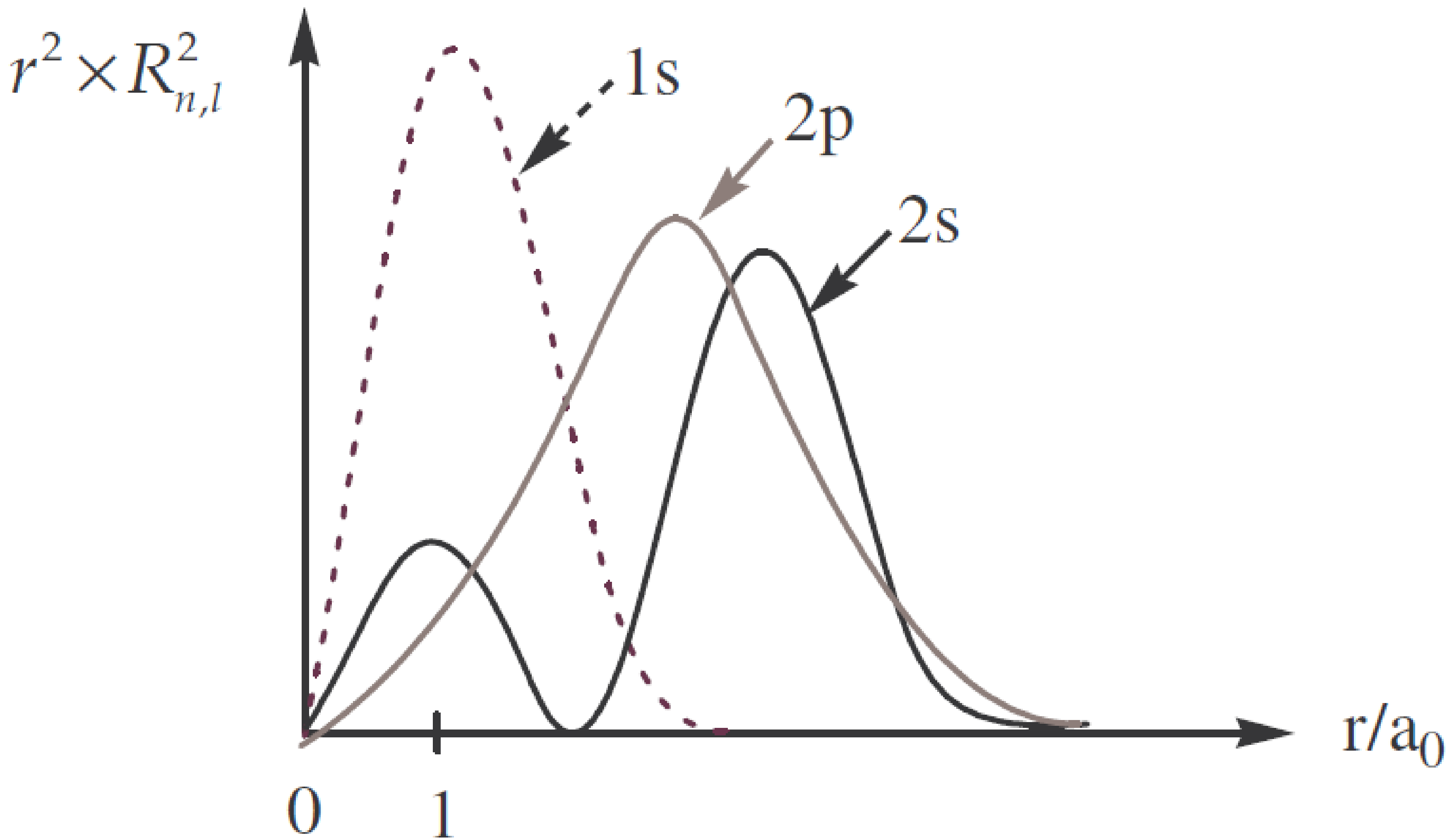
$$\Psi_{n,l,m_l}(r,\theta,\phi) = R_{n,l}(r) . \Theta_{n,|m_l|}(\theta) . \Phi_{m_l}(\phi)$$

# Exemples de parties radiales

| Type d'O.A. | Partie radiale $R_{n,l}(r)$ |
|---|---|
| $1s$ | $R_{1,0}(r) = (Z/a_0)^{3/2}\, 2\exp(-\omega/2)$ |
| $2s$ | $R_{2,0}(r) = (Z/a_0)^{3/2}\left(1/2\sqrt{2}\right)(2-\omega)\exp(-\omega/2)$ |
| $2p$ | $R_{2,1}(r) = (Z/a_0)^{3/2}\left(1/2\sqrt{6}\right)\omega\exp(-\omega/2)$ |
| $3s$ | $R_{3,0}(r) = (Z/a_0)^{3/2}\left(1/9\sqrt{3}\right)(6-6\omega+\omega^2)\exp(-\omega/2)$ |
| $3p$ | $R_{3,1}(r) = (Z/a_0)^{3/2}\left(1/9\sqrt{6}\right)(4-\omega)\omega\exp(-\omega/2)$ |
| $3d$ | $R_{3,2}(r) = (Z/a_0)^{3/2}\left(1/9\sqrt{30}\right)\omega^2\exp(-\omega/2)$ |

où $\omega = 2Zr/na_0$ ; $a_0 = 52{,}92$ pm et $Z$ est le numéro atomique

# Densité radiale de probabilité de présence



# Exemples de parties angulaires

| $l$ | $m_l$ | Partie angulaire $Y_{l,m_l}(\theta,\varphi)$ |
|---|---|---|
| 0 | 0 | $1/\left(2\sqrt{\pi}\right)$ |
| 1 | 0 | $(1/2)\sqrt{3/\pi}\cos\theta$ |
| 1 | $\pm 1$ | $\pm(1/2)\sqrt{3/2\pi}\sin\theta.e^{\pm i\varphi}$ |
| 2 | 0 | $(1/4)\sqrt{5/\pi}\left(3\cos^2\theta - 1\right)$ |
| 2 | $\pm 1$ | $\pm(1/2)\sqrt{15/2\pi}\cos\theta\sin\theta.e^{\pm i\varphi}$ |
| 2 | $\pm 2$ | $(1/4)\sqrt{15/2\pi}\sin^2\theta.e^{\pm 2i\varphi}$ |