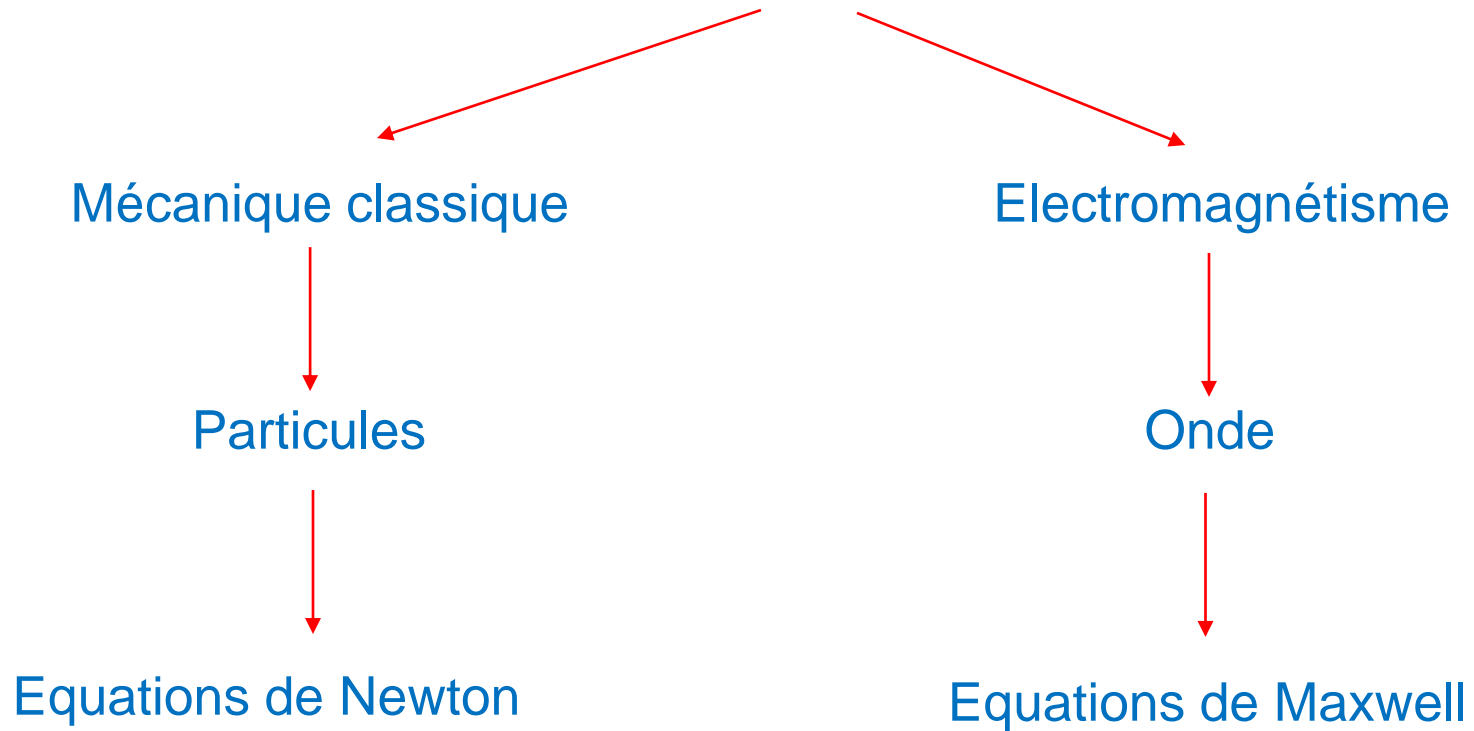


Théories classiques

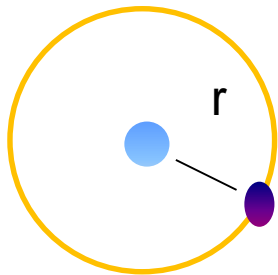


Description du monde par des théories classiques

Puis ces théories se révèlent incapables de rendre compte de nouvelles observations expérimentales:

- Stabilité de l'atome.
- Spectre de raies pour les atomes (en particulier l'hydrogène).
- Diffraction des particules (e^- , neutrons, ...).
- Effet photoélectrique.
- Emission du corps noir.
- ...

Exemple 1 : Stabilité de l'atome



noyau : masse M
charge $+Ze$

électrons : masse m
charge $-e$

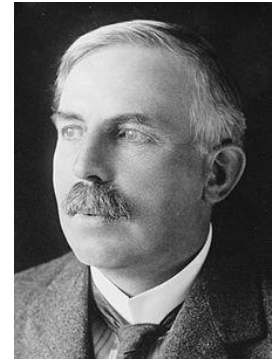
Hydrogène :

noyau = 1 proton
1 charge $+e$

1 électron
1 charge $-e$

Description classique l'atome: modèle Planétaire de Rutherford

Les électrons décrivent un mouvement
circulaire autour du noyau à vitesse
constante



 Ernest Rutherford
1871 - 1937

Application à un système atomique à 1 électron :

1 électron autour d'un noyau chargé $+Ze$ (hydrogénoïde)

$$F_{coulomb} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r^2} \qquad F_{centrifuge} = \frac{m v^2}{r}$$

$$\sum \vec{F} = \vec{0} \quad \Rightarrow \quad \frac{m v^2}{r} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r^2} = 0 \quad \Rightarrow \quad v^2 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{mr}$$

$$E_{\text{Totale}} = T + V$$

$$T = \frac{1}{2}mv^2 = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{Ze^2}{2r} \qquad V = - \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{Ze^2}{r}$$

$$E_{\text{Totale}} = - \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{Ze^2}{2r}$$

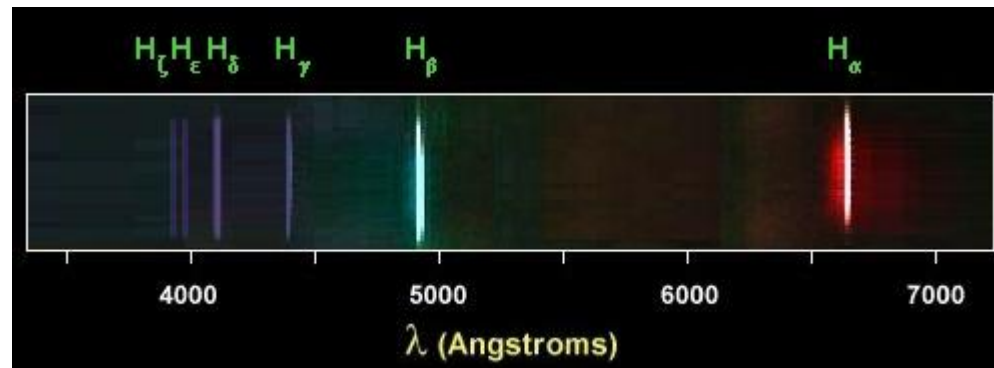
Dans ce modèle, l'énergie totale peut prendre n'importe quelle valeur (fonction de r)

En contradiction avec l'observation d'un spectre de raies pour l'atome d'hydrogène

Le mouvement de rotation de l'électron autour du noyau crée un champs électrique oscillant. L'atome devrait perdre continuellement de l'énergie par émission d'un rayonnement électromagnétique

Les théories classiques ne rendent pas compte de la stabilité de l'atome.

Exemple 2 : Spectres de raies



Le spectre d'émission de l'atome d'hydrogène présente un ensemble de raies interprétables par une **relation empirique proposée par Rydberg**:

$$\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) \quad R_H \longrightarrow \text{constante de Rydberg}$$

$$R_H = 109677,3 \text{ cm}^{-1}$$

n_i et n_f entiers strictement positifs avec $n_i > n_f$



 **Johannes Rydberg**
1854 – 1919

Série	n_f	Région spectrale
Lyman (1906)	1	UV
Balmer (1885)	2	Visible + proche UV
Paschen (1909)	3	IR
Bracket (1922)	4	IR
Pfund (1924)	5	IR

Interprétation du spectre de l'atome d'hydrogène à l'aide du modèle de Bohr

Postulats :

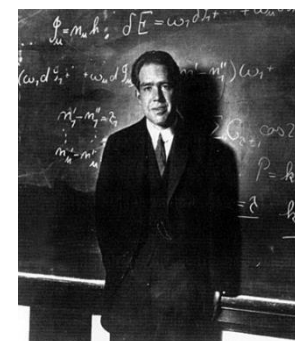
Les électrons décrivent des orbites stationnaires (stables)

L'électron n'émet pas de rayonnement lorsqu'il se trouve sur ces orbites

L'énergie change uniquement lorsque l'électron passe d'une orbite stationnaire à une autre orbite stationnaire.

Le moment cinétique orbitaire est quantifié :

$$\vec{l} = \vec{r} \wedge \vec{p} \longrightarrow |\vec{l}| = n\hbar \quad n = \text{entier strictement positif}$$



 **Niels Bohr**
1885 – 1962

$$pr = n\hbar = n \frac{h}{2\pi} = mvr \Rightarrow v = \frac{nh}{2\pi mr}$$

$$\sum \vec{F} = 0 \Rightarrow \frac{mv^2}{r} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r^2} = 0$$

$$\Rightarrow \frac{m}{r} \frac{n^2 h^2}{4\pi^2 m^2 r^2} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r^2} \quad \Rightarrow \frac{1}{r} = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{Ze^2 4\pi^2 m}{n^2 h^2}$$

$$\left. \begin{array}{l} E_T = - \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{Ze^2}{2r} \\ \frac{1}{r} = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{Ze^2 4\pi^2 m}{n^2 h^2} \end{array} \right\} E_T = - \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{2\pi^2 m e^4}{h^2} \frac{Z^2}{n^2} \quad \Leftrightarrow E_T = -Cst \frac{Z^2}{n^2}$$

La quantification du moment cinétique orbitaire conduit à la **quantification** de l'**énergie totale**, du **rayon** de l'orbite et de la **vitesse** de l'électron

Energie totale :

$$E_n = -13,6 \frac{Z^2}{n^2} (eV)$$

Rayon de l'orbite :

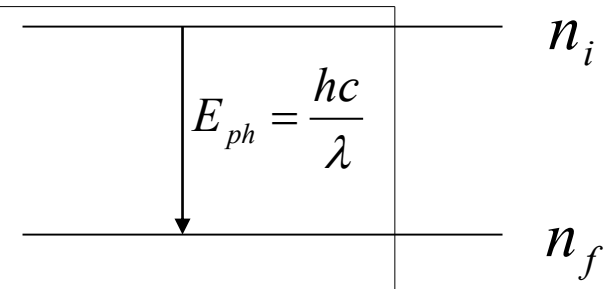
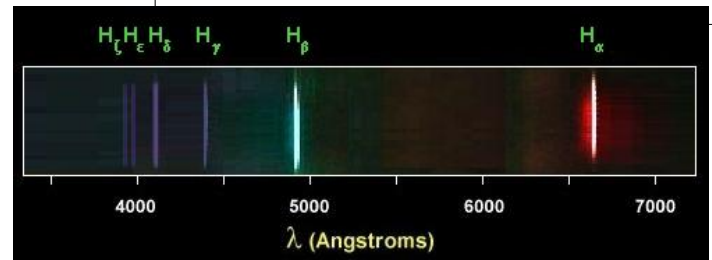
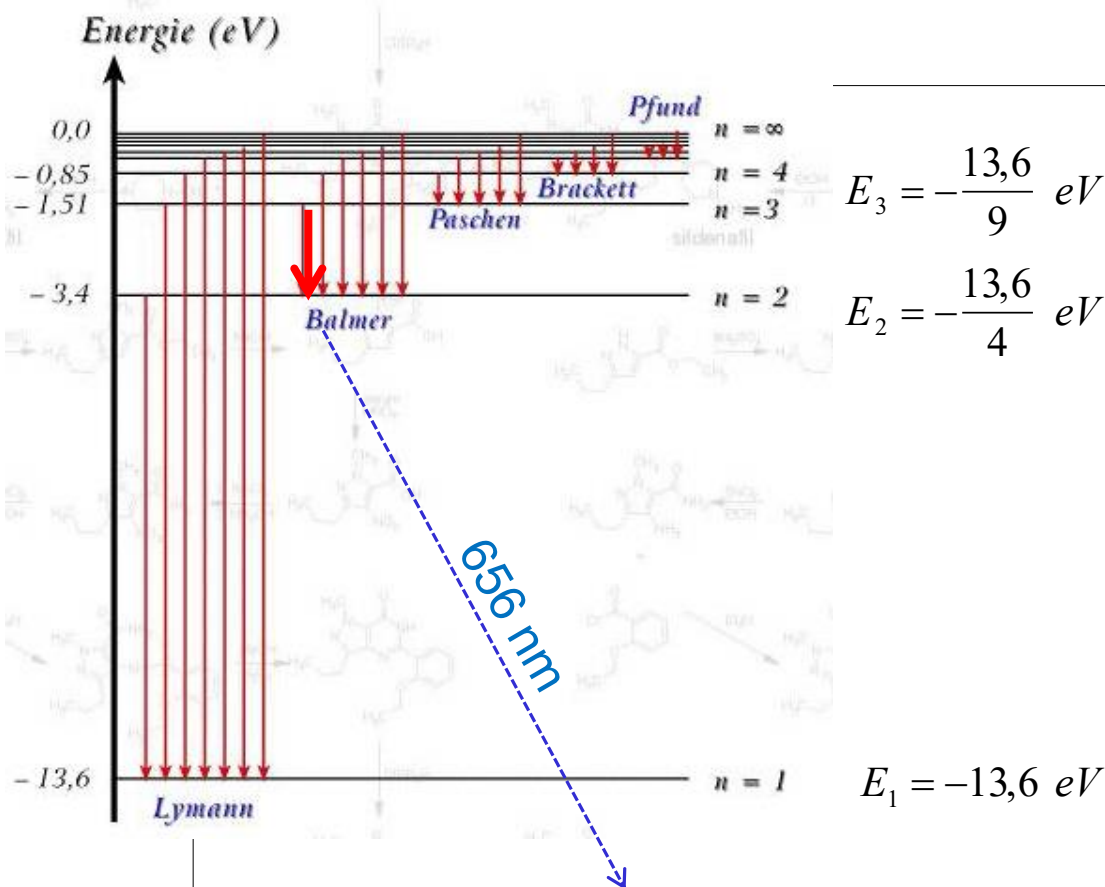
$$r_n = a_0 \frac{n^2}{Z}$$

Vitesse de l'électron :

$$v_n = \frac{e^2}{2\varepsilon_0 h} \frac{Z}{n} = v_0 \frac{Z}{n}$$

$$a_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0 \hbar^2}{me^2} = 0,52917706 \cdot 10^{-10} m$$

Spectre de l'atome d'hydrogène Z = 1



$$\frac{1}{\lambda} = \frac{\Delta E}{hc} = \frac{A}{hc} \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

Relation de Rydberg

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

$$R_H = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{2\pi^2 m e^4 Z^2}{ch^3 n^2}$$

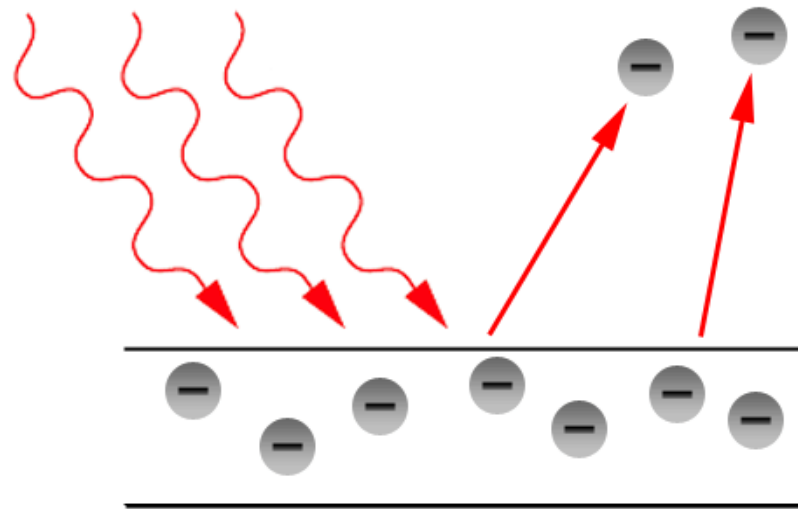
Résumé du modèle de Bohr

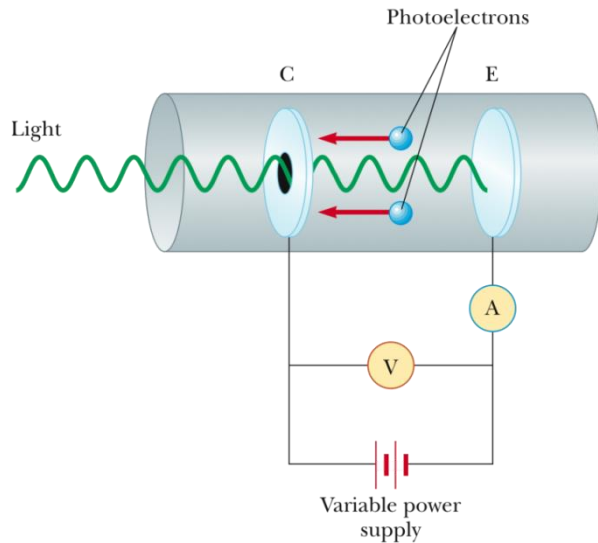
- Niveaux d'énergies quantifiés
- Orbites stables et bien définies
- Interprète correctement le spectre d'émission de H

Mais

- Désaccord avec la physique classique
- Inadapté aux atomes polyélectroniques
- **Origine de la Quantification ?**

Exemple 3 : Effet photoélectrique





- 1887 : montage de Hertz servant à la production et à la détection des ondes électromagnétiques
- Entre 1899 et 1902, en utilisant des tubes ayant un vide poussé, Lenard fait toute une série d'observation

Émission de photoélectrons si $\nu > \nu_0$
(fréquence seuil)

Interprétation par la théorie ondulatoire :

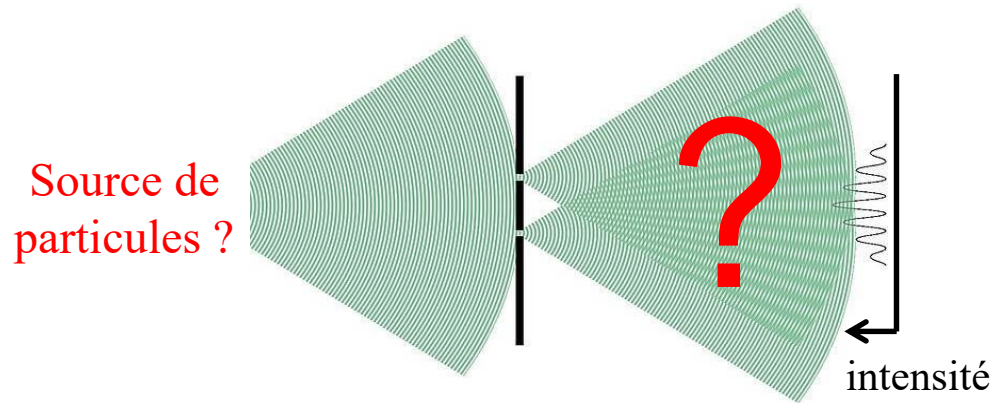
sous l'influence de l'onde électromagnétique, l'électron (dans le métal) se met à vibrer et lorsqu'il possède assez d'énergie pour passer la barrière de potentiel (ϕ), qui le retient, il s'échappe.

Problèmes :

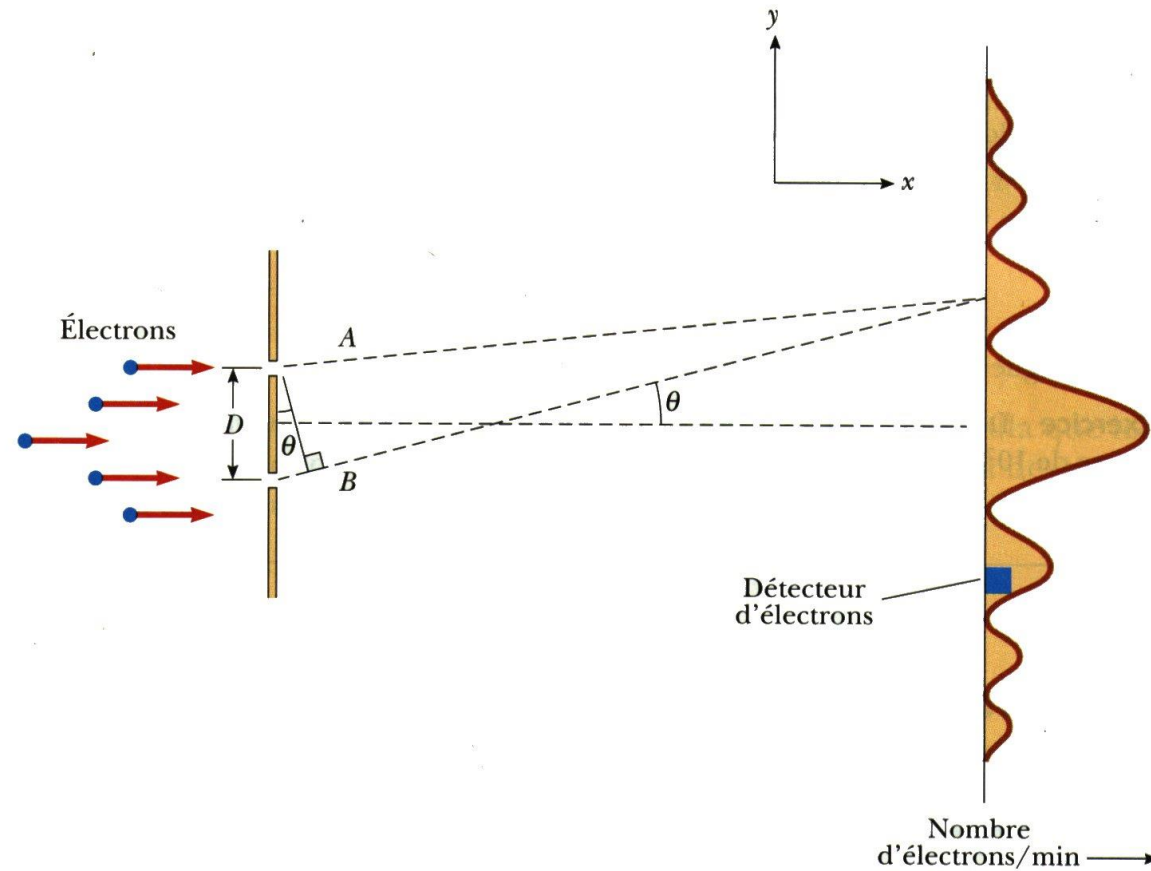
Incapable d'expliquer la fréquence seuil : avec le temps, l'électron devrait toujours acquérir suffisamment d'énergie pour s'échapper.

Incapable d'expliquer pourquoi le potentiel d'arrêt V_0 est indépendant de l'intensité lumineuse...

Exemple 4 : Diffraction des particules



Observation des propriétés ondulatoires de la Matière par diffraction ou par interférence



Nouvelles idées

Dualité onde / corpuscule...

Le quantum – Einstein (1905)

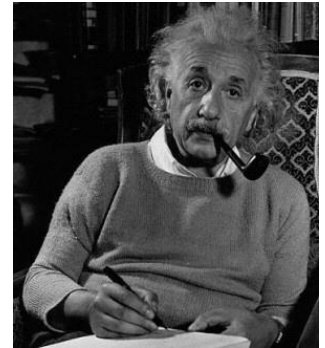
Les ondes électromagnétiques pourraient être constituées de petits paquets d'énergie comparables à des particules élémentaires ? Des **PHOTONS**, qui voyageraient à la vitesse de la lumière. Chaque photon ou **QUANTUM** posséderait une quantité d'énergie




$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$$

Louis de Broglie (1924)



Si les ondes électromagnétiques se comportent comme des particules, les particules peuvent se comporter comme des ondes !

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}$$



 **Albert Einstein** 
(1879 – 1955)




  **Louis de Broglie**
1892 - 1987

Dualité onde / corpuscule

Conséquences...

Explication quantique de l'effet photoélectrique

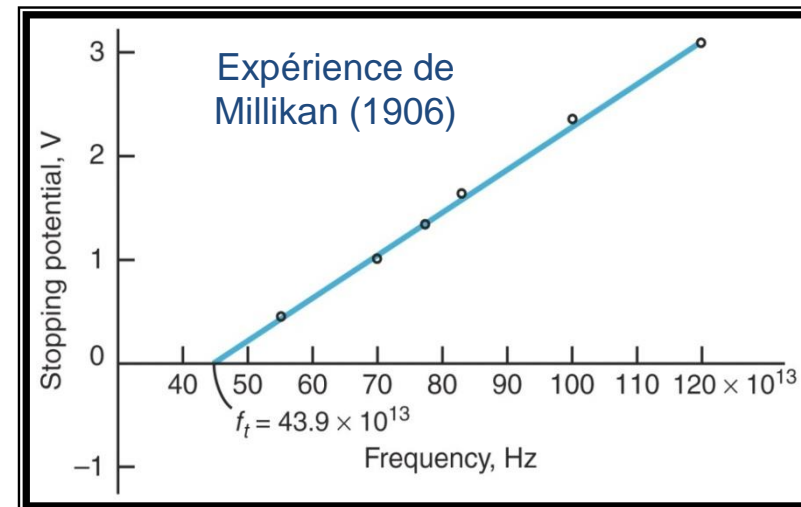
Einstein (1905) : Il s'agit d'une collision parfaitement élastique

$$h\nu = \phi + \frac{1}{2}mv^2$$

$$\text{Puisque : } \frac{1}{2}mv^2 = eV_0$$

$$\text{Alors: } h\nu = W_e + eV_0$$

Où $h\nu$ est l'énergie d'un photon.



Dualité onde / corpuscule

Conséquences...

Origine de la quantification de l'énergie dans les atomes

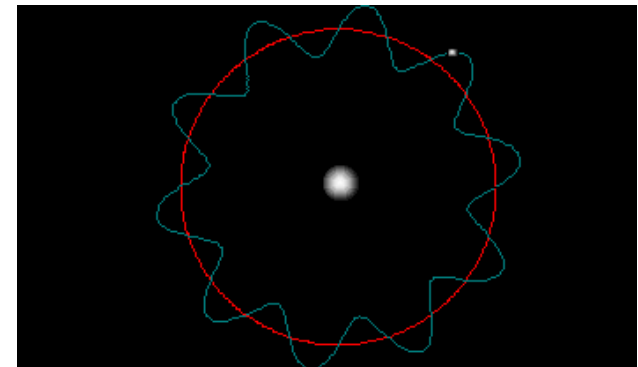
À toute particule matérielle de **masse m** et de **vitesse v** doit être associée une **onde réelle**

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}$$

Rappel des postulats du modèle de Bohr :

$$mvr = n\hbar = n \frac{h}{2\pi} \quad \Rightarrow \quad \frac{h}{mv} = 2\pi r \frac{1}{n}$$

$$\Rightarrow \lambda = 2\pi r \frac{1}{n}$$



*Interprétation simpliste mais parlante
de l'onde stationnaire associée
de l'électron dans l'atome d'hydrogène
en supposant une orbite circulaire*

Dualité onde / corpuscule

Conséquences...

Les aspects corpusculaires et ondulatoires de la matière sont inséparables

Il faut abandonner le concept classique de trajectoire et introduire la notion d'**état** caractérisé par une **fonction d'onde**

$$\psi(x, y, z, t)$$

$\psi(x, y, z, t)$ est interprétée comme une **amplitude de probabilité de présence**

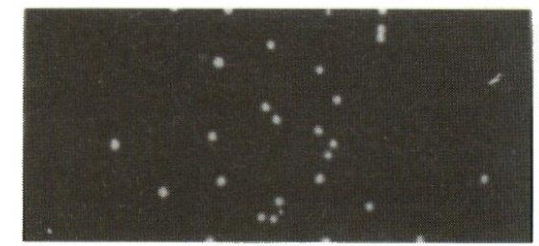
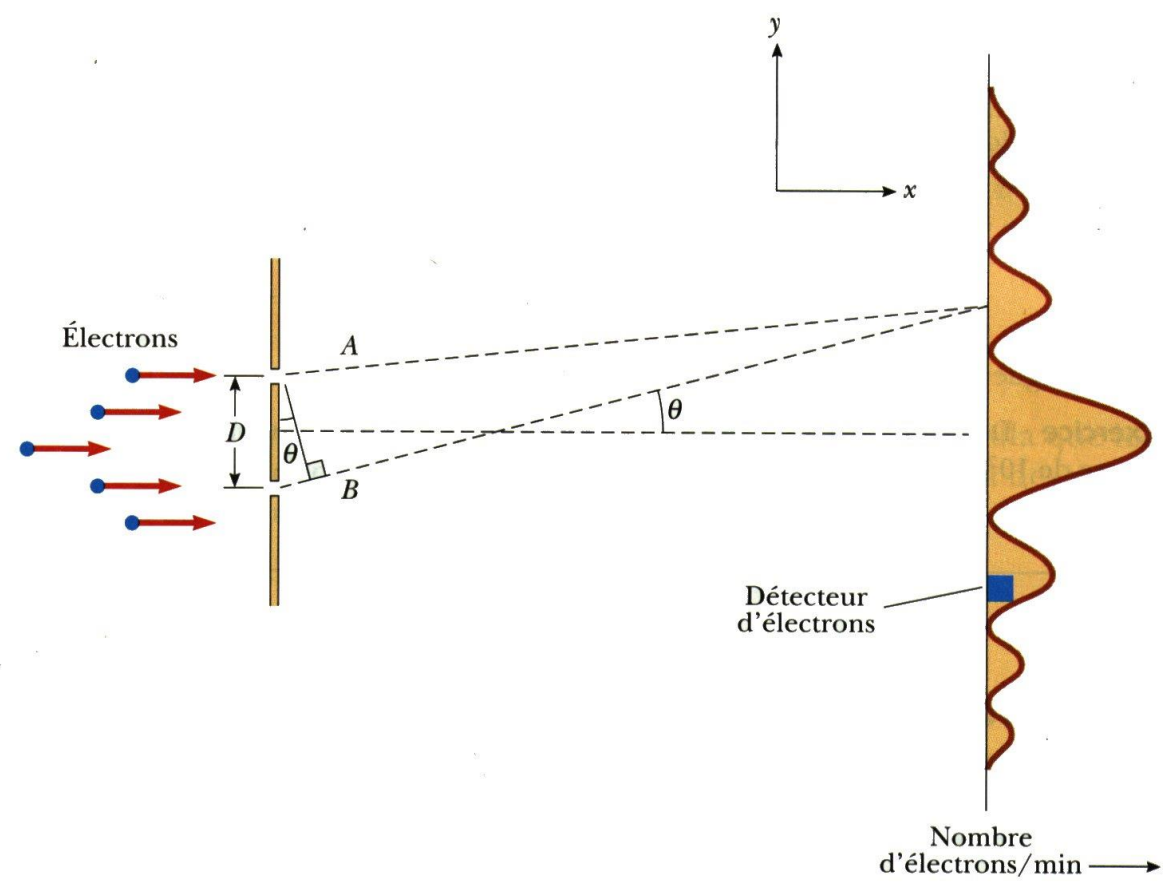
$|\psi|^2 = \psi \cdot \psi^*$ représente la **densité de probabilité de présence**



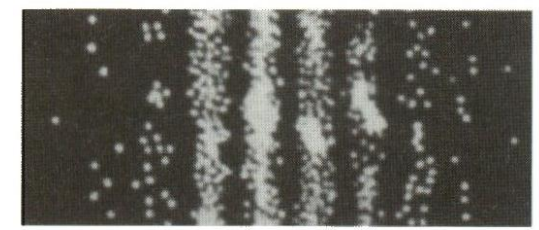
Erwin Schrödinger
 (1887 – 1961)

L'**équation de Schrodinger** (1926) donne l'évolution dans le temps de la fonction $\psi(x, y, z, t)$

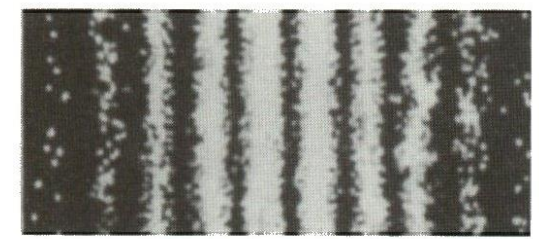
Observation des propriétés ondulatoires de la Matière par diffraction ou par interférence



(a) 28 électrons



(b) 1 000 électrons



(c) 10 000 électrons