

### 4. Aspects ondulatoires

En 1925, DE BROGLIE postule qu'à tout mouvement de particule (l'électron par exemple) est associé une onde telle que  $\lambda = h/mv$  ( $h$  constante de PLANCK,  $m$  masse de la particule,  $v$  sa vitesse).

Dès 1926, DAVISSON et GERMER font diffracter des électrons.

La nature ondulatoire de l'électron (DE BROGLIE) est reliée à la quantification de son énergie (BOHR) en énonçant le principe suivant:

*Dans un mouvement périodique (circulaire, oscillant autour d'un point d'équilibre) sous l'action d'un champ de forces duquel la particule ne peut s'échapper, une onde doit retourner à son premier état au bout d'un nombre entier de longueur d'onde (onde stationnaire); il vient alors :  $2\pi r = n\lambda$ .*

Comme  $\lambda = h/mv$ , on retrouve la quantification de BOHR {4}.

Chaque électron du système voit son état représenté par un fonction d'onde  $\Psi$  qui est solution de l'équation de SCHRÖDINGER qui régit l'énergie du système ( $E$ : énergie totale du système,  $V$ : énergie potentielle):

$$\frac{\delta^2\Psi}{\delta x^2} + \frac{\delta^2\Psi}{\delta y^2} + \frac{\delta^2\Psi}{\delta z^2} + \frac{8\pi^2m}{h^2}(E - V)\Psi = 0$$

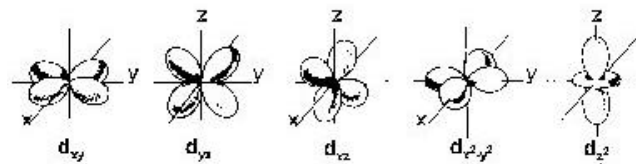
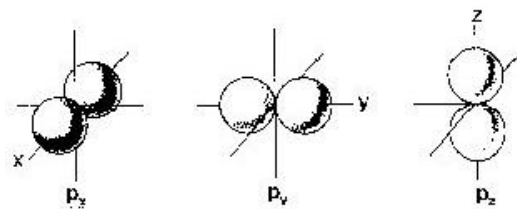
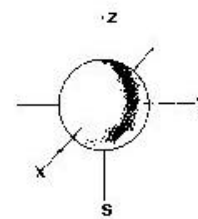
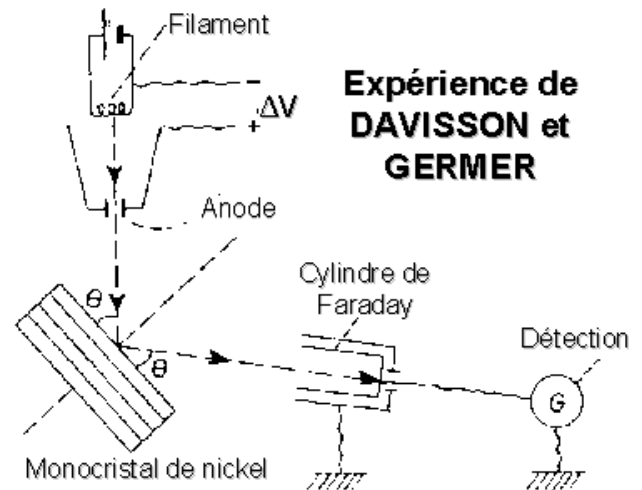
L'équation peut être résolue pour certaines valeurs propres de  $E$  et donne les différentes fonctions d'onde représentant le système d'électrons. Une propriété importante de cette équation réside dans le fait que toute combinaison linéaire des solutions est aussi solution.

C'est une vision statistique du système électronique. En fait, la quantité  $\Psi^2$  est proportionnelle à la probabilité de présence de l'électron (décrit par  $\Psi$ ) dans un volume donné ( $P = \int_0^\infty \Psi^2 dv = 1$  est la condition de normalisation).

La fonction d'onde  $\Psi$  va dépendre de la valeur des " nombres quantiques  $n, l, m$  " :

$$\Psi_{n,l,m} = R_{n,l}(r) \cdot \Theta_{l,m}(\theta) \cdot \Phi_m(\varphi)$$

en coordonnées sphériques  $(r, \varphi, \theta)$ .



### 5. Les nombres quantiques

- n** nombre quantique principal ( $n > 0$ ): définit l'énergie moyenne de l'électron situé dans la "couche" ( $K, L, M, \dots$ ).
- l** nombre quantique secondaire (azimuthal)  $0 \leq l \leq n$   
Il caractérise la forme des orbitales atomiques (volume où la probabilité de trouver l'électron considéré est au moins égale au seuil de probabilité  $P$  fixé arbitrairement):
 

<b>0</b>	orbitale <b>s</b>	<i>sphérique</i>	<b>2</b>	orbitale <b>d</b>	<i>haltères croisés</i>
<b>1</b>	orbitale <b>p</b>	<i>haltère</i>	<b>3</b>	orbitale <b>f</b>	<i>multilobes complexe</i>
- m** nombre quantique magnétique  $-l \leq m \leq +l$  il y a  $(2l+1)$  orbitales  
Il caractérise les différentes possibilités d'orientation spatiale des orbitales (voir figure ci-dessus).
- s** nombre quantique de spin  $s = \pm 1/2$   
Il caractérise les 2 états de rotation possibles de l'électron sur lui-même.

Principe d'exclusion de PAULI :

**Deux électrons d'un même atome ne peuvent avoir les 4 mêmes nombres quantiques : en conséquence, une orbitale atomique contient au plus 2 électrons.**