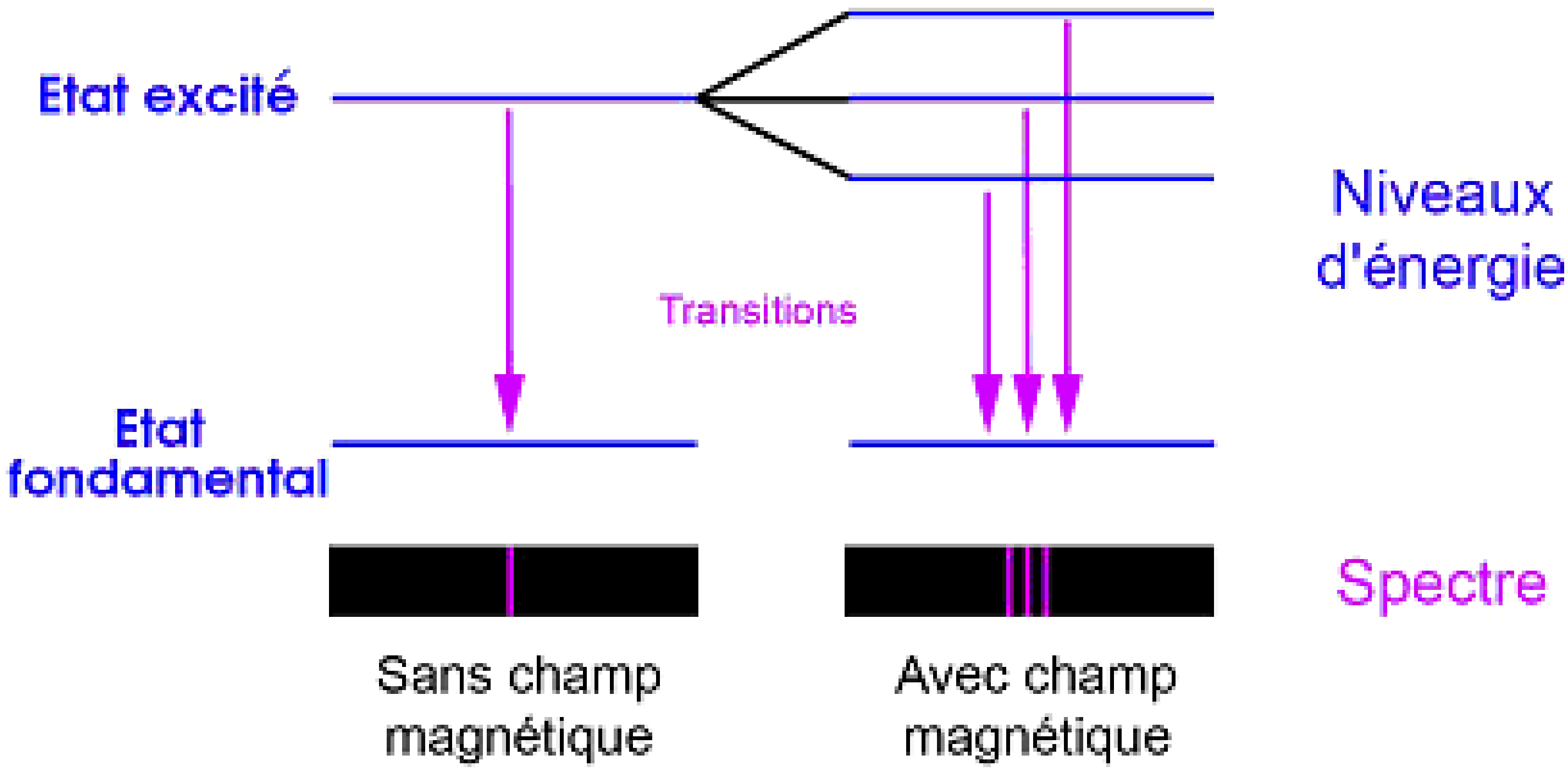
ZEEMAN


Etat excité
Niveaux d'énergie
Transitions
Etat fondamental
Spectre
Sans champ magnétique
Avec champ magnétique

Équation de Schrödinger:

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

x, y et z sont les coordonnées cartésiennes de l'électron dans un repère lié au noyau.

m est la masse de l'électron. h est la constante de Planck

Ψ : Fonction d 'onde (ou orbitale)

E : Energie totale de la particule

V : Energie potentielle de la particule

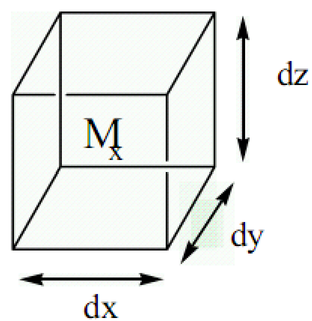
Ψ n 'a pas de signification physique propre.

Ψ^2 est proportionnel à la probabilité de présence de la particule dans «un élément» de volume dV $\quad dP = \Psi^2 \, dV$

1) La probabilité de présence de l'électron dans l'élément de volume $dv = dx \cdot dy \cdot dz$ centré en $M(x,y,z)$:

$$dP(dv) = |\Psi(x,y,z)|^2 \, dx \, dy \, dz$$

la probabilité de trouver l'électron dans une région de l'espace dV autour d'un point M(x,y,z), sera d'autant plus grande que le carré du module de Ψ sera plus grand

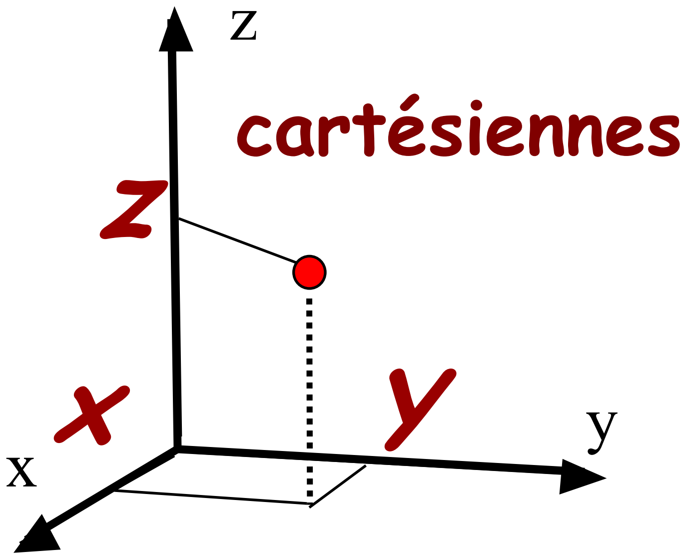


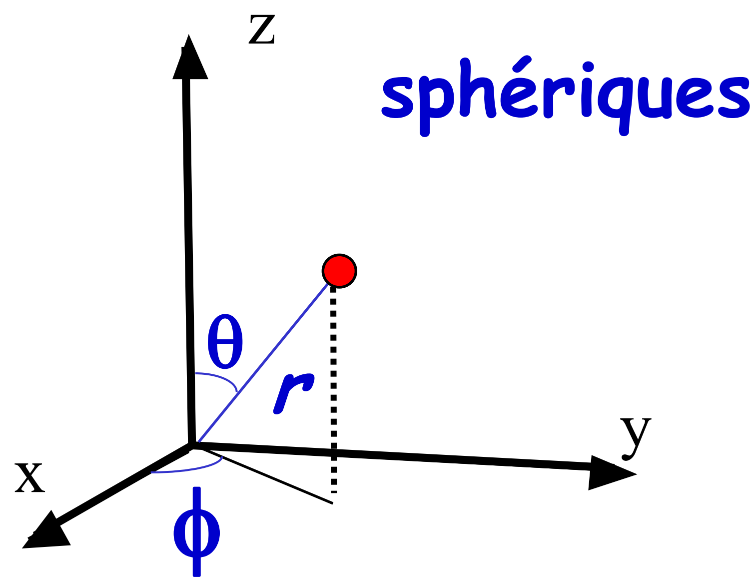
dP = densité de probabilité
$dP = |\Psi(M)|^2 dV$
avec $dV = dx\, dy\, dz$

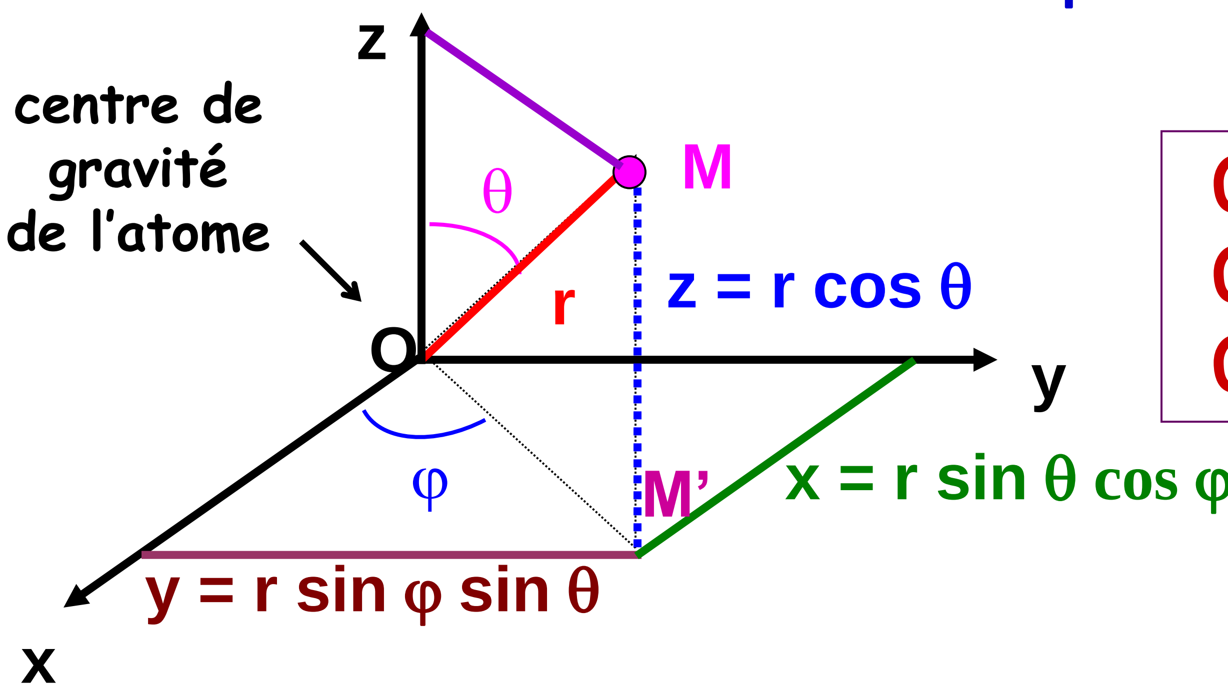
2) L'électron est localisé avec certitude dans l'espace infini :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,y,z)|^2 \, dx \, dy \, dz = 1$$

3) La notion de trajectoire électronique est remplacée par un nuage électronique plus ou moins opaque, l'opacité étant proportionnelle à $|\Psi(x,y,z)|^2$



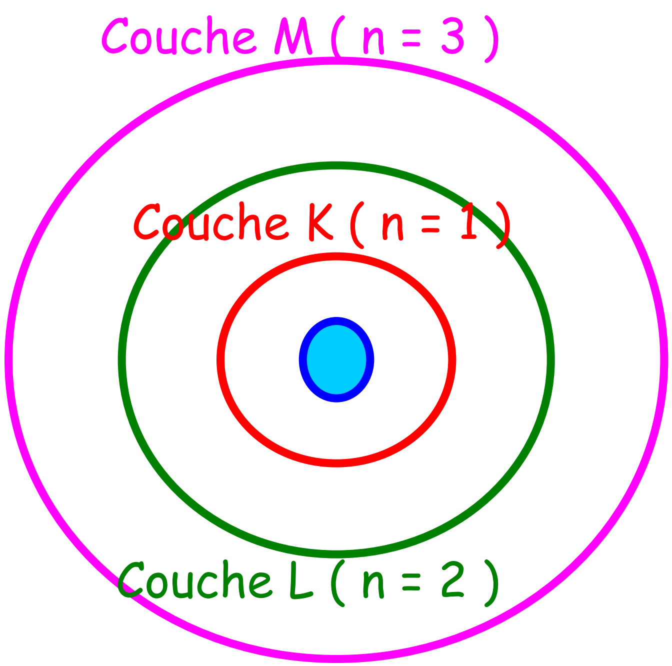




$0 \leq r \leq +\infty$
$0 \leq \theta \leq \pi$
$0 \leq \varphi \leq 2\pi$

La couche électronique est parfois indiquée par une lettre MAJUSCULE au lieu de la valeur numérique de n.

Valeur de n	1	2	3	4	5	6	7	8
Symbole de la couche	K	L	M	N	O	P	Q	R



Symbolisation du cortège électronique : Les Z électrons de l'atome neutre se répartissent sur plusieurs couches successives de plus en plus éloignées du noyau au fur et à mesure de l'augmentation de n.

Volume ↑ quand n ↑

Exemples d'expression analytique de fonctions d'ondes (réelles).

$$\Psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \times \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \times e^{-\frac{Z \times r}{a_0}}$$

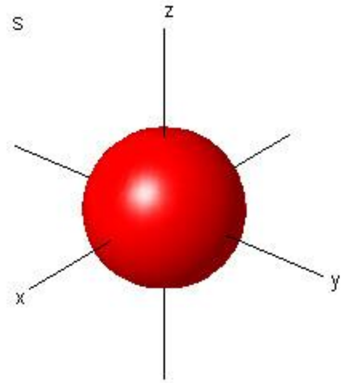
$$\Psi_{2s} = \frac{1}{4\sqrt{2}\ \pi} \times \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \times \left(2 - \frac{Z \times r}{a_0}\right) \times e^{-\frac{Z \times r}{2 \times a_0}}$$

$$\Psi_{2p_z} = \frac{1}{4\sqrt{2}\ \pi} \times \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \times \frac{Z \times r}{a_0} \times e^{-\frac{Z \times r}{2 \times a_0}} \times \cos(\theta)$$

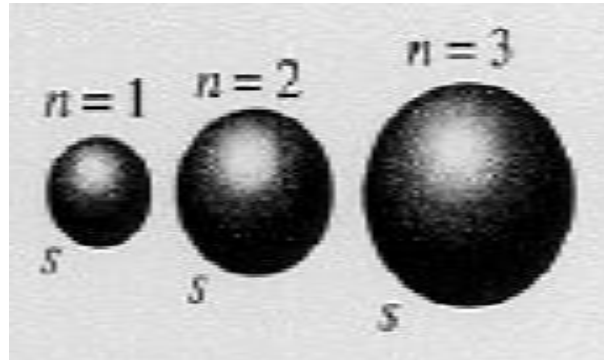
$$\Psi_{2p_x} = \frac{1}{4\sqrt{2}\ \pi} \times \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \times \frac{Z \times r}{a_0} \times e^{-\frac{Z \times r}{2 \times a_0}} \times \sin(\theta)\cos(\phi)$$

$$\Psi_{2p_y} = \frac{1}{4\sqrt{\ }\ \pi} \times \left|\frac{Z}{a}\right|^{\frac{3}{2}} \times \frac{Z \times r}{a} \times e^{-\frac{Z \times r}{2 \times a_0}} \times \sin(\theta)\sin(\phi)$$

Orbitales s



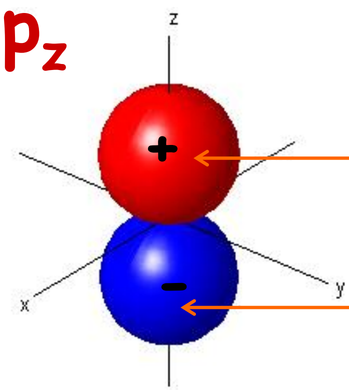
s ne dépend
ni de θ ni de ϕ



Sa « taille » dépend de la valeur de n

Orbitales p. 3 car m = -1, 0 et 1

p_z

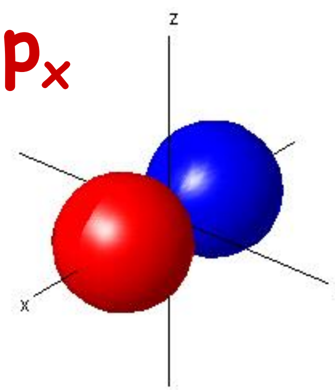


lobe positif
$Y_{l,m} > 0$

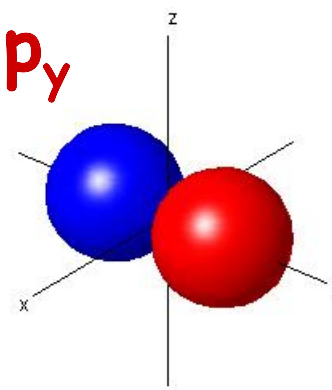
lobe négatif
$Y_{l,m} < 0$

l'angle ϕ
n'intervient pas

p_x

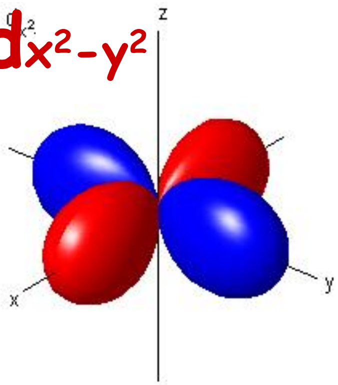


p_y

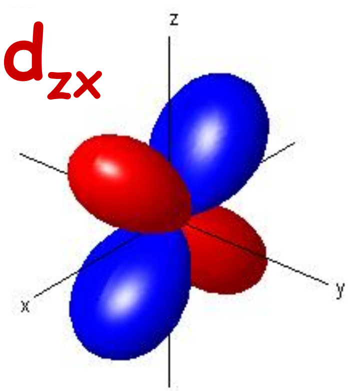


Orbitales d : Il y en a 5 car m = -2, -1, 0, 1, et 2

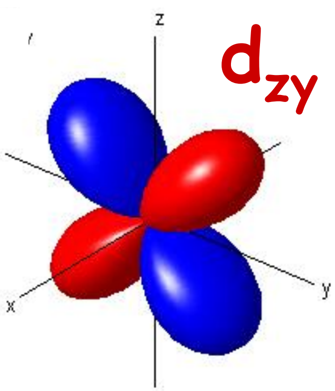
$d_{x^2-y^2}$



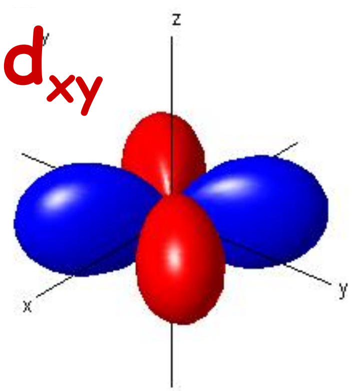
d_{zx}



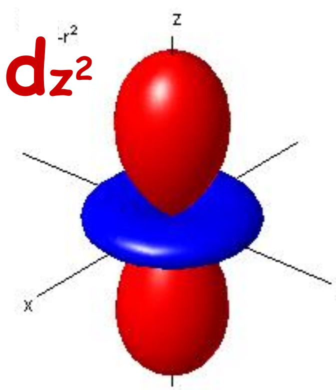
d_{zy}



d_{xy}



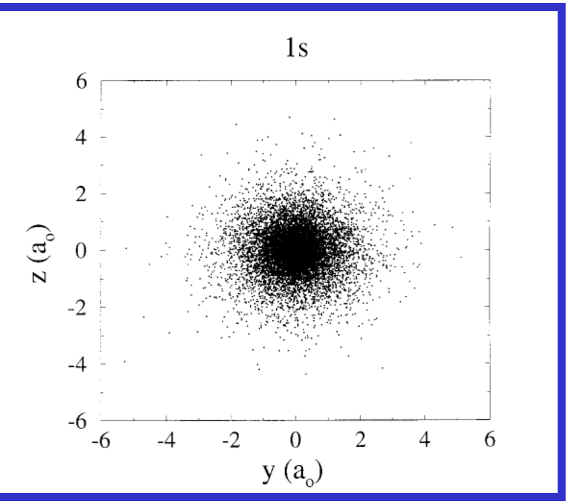
d_{z^2}



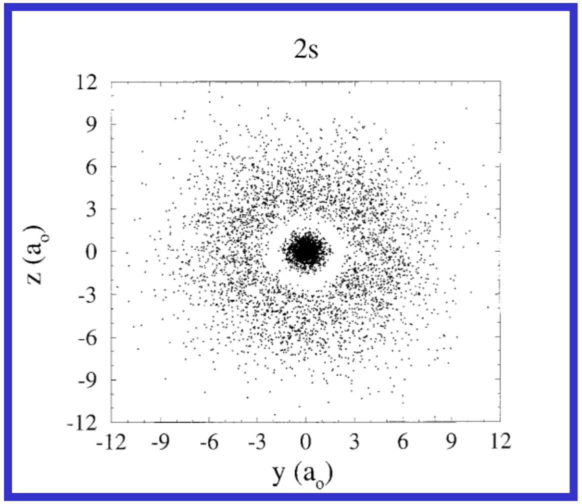
les lobes pointent selon les bissectrices des axes de cordonnées

Oz – axe de symétrie

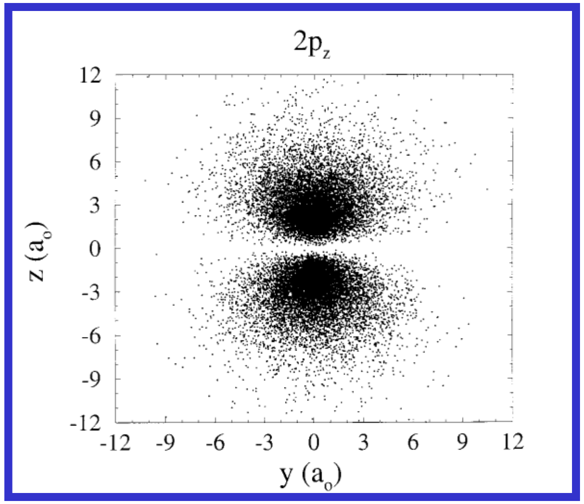
Fonction 1s



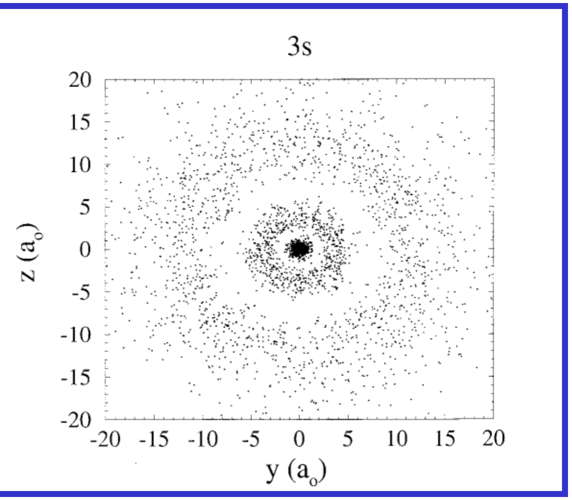
Fonction 2s



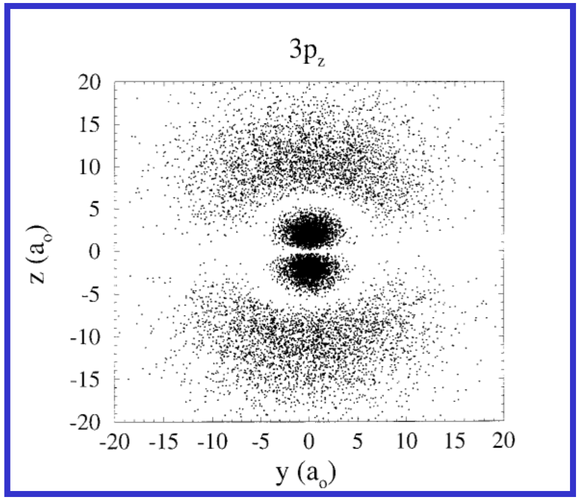
Fonction $2p_z$



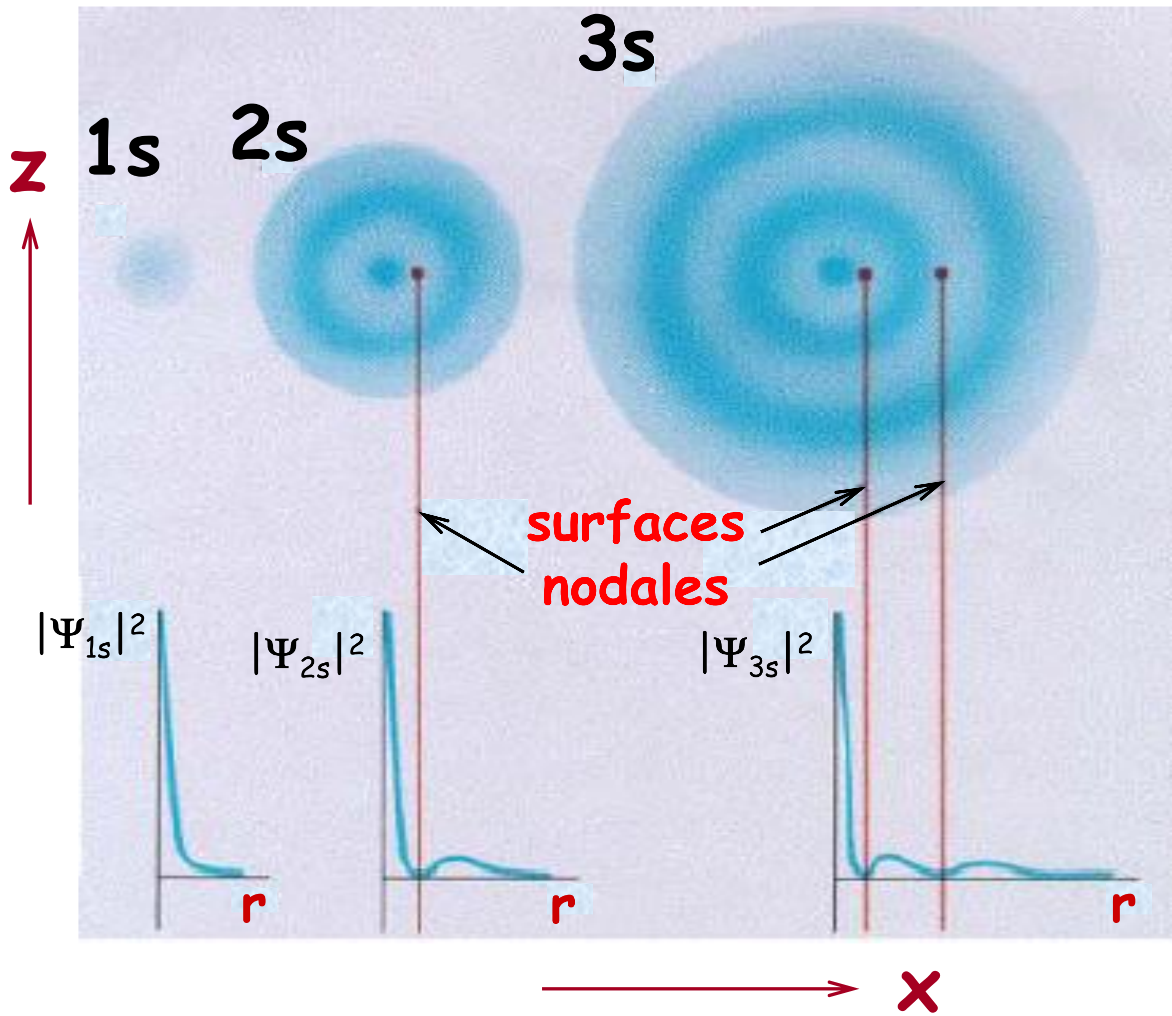
Fonction 3s



Fonction $3p_z$



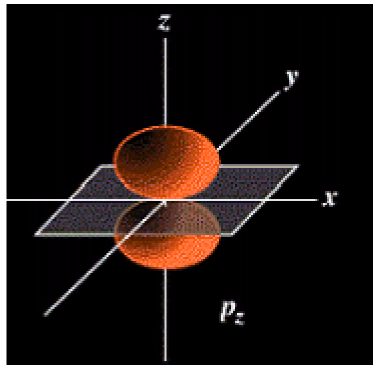
Orbitales s



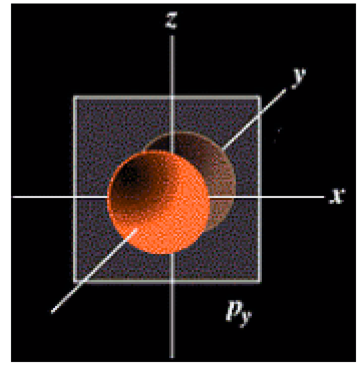
Plans nodaux pour la partie angulaire des orbitales de type p et d :

$\boxed{\ell = 1}$

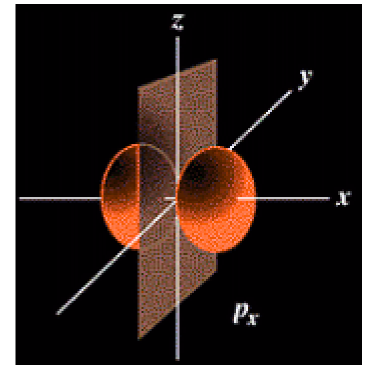
1 plan nodal



plan xy



plan xz



plan yz

$\boxed{\ell = 2}$

2 plans nodaux