

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique
Université Mustapha Stambouli de Mascara



Faculté des Sciences Exactes
Département de Physique

Cours de Physique Atomique

**Destiné aux étudiants de troisième année licence LMD : Physique
Fondamentale**

Cours enseigné au Sixième Semestre

Option: Physique Fondamentale

Rédigé par : Dr MONIR Mohammed El Amine

E-mail : mohammed.monir@univ-mascara.dz / moniralpha29@gmail.com

Année Universitaire 2021/2022

Avant-propos

La physique atomique est un domaine qui traite les phénomènes en relation avec l'atome et ses propriétés, dans une échelle atomique. Historiquement cette discipline est à l'origine de toute la physique des quanta, et elle a joué un rôle absolument déterminant dans la physique de tout le 20^{ème} siècle. De nos jours cette discipline couvre un champ très vaste et ses développements se trouvent finalement dispersés dans de nombreuses spécialités. Par exemple: le magnétisme, les propriétés optiques des solides, l'analyse chimique, l'imagerie par résonance magnétique, les lasers...

Ce cours comporte les principaux principes de la physique atomique, il se prolonge sur les concepts fondamentaux de la physique moderne.

Ce support est un guide qui est absolument nécessaire afin de développer des connaissances avancées dans le domaine de la physique atomique, ainsi il consiste à découvrir la propriété indéfinie, indéterministe et contradictoire de la physique atomique.

Ce cours est destiné aux étudiants de la troisième année licence LMD, de spécialité physique fondamentale, il dévoile un bref résumé de la physique atomique, en débutant par une initiation sur la description de l'atome, sur la définition des transitions radiatives, et en finissant par les processus permettant la production des rayons X.

Table des Matières

Introduction	02
Chapitre I. Les atomes hydrogénoïdes.....	03
1. Introduction.....	03
2. Rappels des résultats du modèle de Bohr-Sommerfeld.....	03
3. Traitement quantique de l'atome d'hydrogène.....	07
4. Les fonctions propres des états stationnaires.....	08
5. Distribution spatiale de la densité électronique.....	10
6. Valeurs moyennes des grandeurs d'espace.....	11
7. Parité d'un état hydrogénoïde.....	13
8. Exercices.....	15
9. Solutions.....	17
Chapitre II. Les atomes à plusieurs électrons.....	19
1. Introduction.....	19
2. Le modèle en couche.....	19
3. Les atomes alcalins.....	23
4. L'atome d'hélium.....	27
5. Exercices.....	31
6. Solutions.....	33
Chapitre III. Transitions radiatives.....	37
1. Introduction.....	37
2. Probabilités de transition.....	37
3. Formes des raies spectrales.....	40
4. Quelques applications.....	42
5. Exercices.....	45
6. Solutions.....	47
Chapitre IV. Les rayons X.....	48
1. Introduction.....	48
2. Production et propriétés	48
3. Loi de Moseley.....	53
4. Effet Auger.....	55
5. Exercices.....	57
6. Solutions.....	58
Références.....	59

Introduction

La physique atomique est née des expériences effectuées à la fin du XIX^e siècle qui ont montré que la matière était discontinue et formée d'atomes possédant une structure interne ; celle-ci étant à l'origine des raies observées dans les spectres d'émission et d'absorption du rayonnement par les différents éléments, l'objectif premier de la physique atomique a été de comprendre et d'interpréter ces spectres.

Le développement de cette discipline est intimement lié à celui de la mécanique quantique. La grande précision des expériences de spectroscopie a conduit les physiciens théoriciens à énoncer des théories quantiques toujours plus élaborées ; en retour, les expérimentateurs ont effectué des mesures de plus en plus précises afin d'éprouver la validité de la théorie. Cette émulation réciproque a permis d'obtenir des mesures de grandeurs physiques fondamentales avec une précision sans cesse accrue.

C'est au XX^e siècle que la physique atomique a connu un essor extraordinaire grâce à la réalisation d'expériences d'une très grande précision et à la découverte et au développement de la théorie quantique par des physiciens de génie, parmi lesquels on peut citer Planck, Einstein, Rutherford, Bohr, Heisenberg, Schrödinger, Born, Dirac, et plus récemment Feynman, Tomonaga Shinichiro et Schwinger.

Chapitre I

Les atomes hydrogénéoïdes

1.1. Introduction.

Dans ce chapitre on va traiter l'atome hydrogénéoïde par une étude quantique qui permet de déterminer les valeurs propres et les états propres de l'équation de Schrödinger et par l'application du modèle de Bohr-Sommerfeld. On est censé dans ce chapitre de décrire l'état normal de l'atome hydrogénéoïde (l'énergie fondamentale et les fonctions propres de cet état fondamental). Les fréquences de transitions dues aux phénomènes de l'absorption et de l'émission de cet atome hydrogénéoïde doivent être aussi déterminées.

1.2. Rappels des résultats du modèle de Bohr-Sommerfeld.

1.2.1. La Théorie de Bohr.

Abondons l'étude de la théorie de Bohr. Examinons un atome dit « hydrogénéoïde », c'est-à-dire un système composé d'un noyau de charge $+Ze$ et un électron.

Pour $Z = 1$, ce système est constitué par l'atome d'hydrogène.

Pour $Z = 2$, ce système est constitué par l'atome d'hélium He^+ simplement ionisé.

Pour $Z = 3$, ce système est constitué par l'atome de lithium Li^{++} doublement ionisé.

Pour $Z = 4$, on a Be^{3+} .

On peut considérer que l'interaction de l'électron avec le noyau dans le modèle choisi obéit à la loi de Coulomb, c'est-à-dire que la force avec laquelle le noyau retient l'électron doit être égale à : Ze^2/r^2 .

On peut appliquer au modèle choisi toutes les solutions du problème de Kepler en mécanique classique. L'énergie du système (cinétique et potentielle) doit être égale à :

$$E = \frac{-Ze^2}{2a} \quad (I-2-1)$$

Où a est le demi-grand axe de l'ellipse.

Dans le cas de l'orbite circulaire et d'après la troisième loi de Kepler, le rayon a été lié à la période de révolution T par la relation :

$$\frac{a^3}{T^2} = a^3 v^{*2} = \frac{Ze^2}{4\pi^2 m} \quad (I-2-2)$$

La seconde relation est donnée par la règle de quantification du moment cinétique.

$$L_z = n\hbar$$

$$L_z = ma^2\dot{\phi} = 2\pi ma^2 v^* = n\hbar$$

D'où, considérant :

$$a^2 v^* = \frac{n\hbar}{2\pi m} \quad (I-2-3)$$

Combinant (I-2) avec (I-3) on trouve facilement :

$$a_n = n^2 \frac{\hbar^2}{mZe^2} \quad (I-2-4)$$

Pour $Z = 1$ et $n = 1$ (première orbite de l'atome d'hydrogène), on trouve $a_1 = \frac{\hbar^2}{mZe^2} = 0.528 \times 10^{-10} m = 0.528 \text{ \AA}$. Cette combinaison des constantes universelles, portant la valeur de (I-4) dans (I-1), on obtient :

$$E_n = -\frac{Ze^2}{2a_n} = -\frac{mZ^2 e^4}{2\hbar^2 n^2} \quad (I-2-5)$$

En donnant à n les valeurs entières d'une suite naturelle 1, 2, 3, ... on obtient les valeurs quantifiées de E_1, E_2, E_3, \dots

Profitant de la condition des fréquences : $hc\bar{\nu} = E_n - E_k$, on obtient la formule généralisée de Balmer pour les atomes hydrogénéoïdes sous la forme :

$$\bar{\nu} = \frac{mZ^2 e^4}{4\pi\hbar^3 c} \left(\frac{1}{k^2} - \frac{1}{n^2} \right); \quad n \geq k \quad (I-2-6)$$

Pour y posant $Z = 1$, on obtient la formule de Balmer spécialement applicable à l'atome d'hydrogène, la constante de Rydberg exprimée en fonction des constantes universelles.

$$R = \frac{me^4}{4\pi\hbar^3 c} \quad (I-2-7)$$

Avec :

$$\begin{cases} c = 2.997933 \times 10^{10} \text{ cm/s} \\ \hbar = 1.0544 \times 10^{-34} \text{ J.s} \\ e = 1.6 \times 10^{-19} \text{ C} \end{cases}$$

Alors que la quantité R_H obtenue empiriquement par les mesures spectroscopiques les plus fines : $R_H = 109677.581 \text{ cm}^{-1}$.

La correspondance des valeurs de R obtenues par le calcul théorique et expérimental est si proche qu'elle ne laisse aucun doute sur la justesse de la formule (I-7).

Notamment, on avait supposé que le noyau de l'atome d'hydrogène était immobile, or d'après les lois de la mécanique, il faut considérer le mouvement de l'électron et du noyau autour de leur centre d'inertie commun. Pour la solution correcte du problème de deux corps dans la formule (I-5), il faut introduire au lieu de la masse de l'électron la masse réduite de l'électron et du noyau.

$$m' = \frac{mM_Z}{m + M_Z}$$

Où M_Z est la masse du noyau du numéro atomique Z . La formule (I-7) a alors la forme suivante :

$$R_Z = \frac{m'e^4}{4\pi\hbar^3c} = \frac{me^4}{4\pi\hbar^3c\left(1+\frac{m}{M_Z}\right)} \quad (I-2-8)$$

Pour l'hydrogène $M_Z = M_H$.

$$R_H = \frac{me^4}{4\pi\hbar^3c\left(1+\frac{m}{M_H}\right)} \quad (I-2-9)$$

Pour $M_Z \rightarrow \infty$, la formule (I-8) se transforme en (I-7).

Si on désigne la quantité R de la formule (I-7) par R_∞ alors :

$$R_H = \frac{R_\infty}{\left(1+\frac{m}{M_H}\right)} \quad (I-2-10)$$

Et la formule générale devient:

$$R_Z = \frac{R_\infty}{\left(1+\frac{m}{M_Z}\right)} \quad (I-2-11)$$

A l'aide de la formule (I-10) on peut définitivement justifier la théorie de la manière suivante:

Calculons R_∞ ; en adoptant $m/M_H = 1/1836.5$, on obtient :

$$R_\infty = R_H \left(1 + \frac{m}{M_H}\right) = 109677.581 \left(1 + \frac{1}{1836.5}\right) = 109736.807 \text{ cm}^{-1}$$

Rapprochant cette valeur de 109737.303 calculée directement, on voit que la coïncidence ne peut pas être meilleure.

1.2.2. La Théorie de Bohr-Sommerfeld.

Bohr ne considère que des orbites circulaires définies par un nombre quantique principal n . Or, lorsqu'on place l'atome d'hydrogène dans un champ extérieur (électrique ou

magnétique), on observe des déplacements, ou même des nouvelles raies, non prévisibles par la théorie de Bohr (effets Stark et Zeeman). Sommerfeld interpréta ce nouveau phénomène en définissant pour chaque valeur de n , un nombre d'orbites elliptiques ; il introduisit ainsi, pour repérer l'état énergétique de l'électron dans l'atome, des nombres quantiques supplémentaires, l et m .

La théorie de Bohr, même complétée par celle de Sommerfeld, ne parvient pas à interpréter les spectres des atomes lourds. Ce modèle est maintenant dépassé mais permet de retrouver par le calcul certaines relations très utiles.

I.3. Traitement quantique de l'atome d'hydrogène.

Abordons les solutions du problème du mouvement de l'électron dans le champ du noyau chargé positivement de charge $|\bar{e}|$. La force liant l'électron au noyau à des distances de l'ordre des dimensions atomiques (10^{-10} m) est la force d'attraction de Coulomb. L'énergie potentielle qui lui correspond est :

$$U = -\frac{e^2}{r} \quad (I-3-1)$$

On doit donc résoudre l'équation aux fonctions propres et aux valeurs propres de l'opérateur de l'énergie, c'est-à-dire de résoudre l'équation de Schrödinger. Puisque dans le cas considéré c'est un champ de forces central, il est nécessaire d'utiliser les coordonnées sphériques.

Le Laplacien prend la forme suivante dans les coordonnées sphériques :

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (I-3-2)$$

comme on le sait, par une symétrie sphérique complète, la fonction d'onde ψ ne dépendra que du rayon vecteur \vec{r} et ne dépendra pas du θ et φ .

L'équation de Schrödinger prend la forme suivante,

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{r} \right) \psi = 0 \quad (I-3-3)$$

En introduisant les notions simplifiées suivantes :

$$\lambda = \frac{2m}{\hbar^2} E \quad \text{et} \quad \alpha = \frac{e^2 m}{\hbar^2}$$

L'équation devient :

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \left(\lambda + \frac{2\alpha}{r} \right) \psi = 0 \quad (I-3-4)$$

I.4. Les fonctions propres des états stationnaires.

La plus simple des solutions de cette équation ayant une valeur finie pour $r = 0$ et tendant vers zéro pour $r \rightarrow \infty$ est :

$$\psi = e^{-\varepsilon r} \quad (I-4-1)$$

Après simplification par $e^{-\varepsilon r}$, on aura :

$$\varepsilon^2 - \frac{2}{r}\varepsilon + \left(\lambda + \frac{2\alpha}{r}\right) = 0 \quad (I-4-2)$$

$$\text{Soit } \varepsilon^2 + \lambda + \frac{2}{r}(\alpha - \varepsilon) = 0$$

$$\varepsilon^2 = -\lambda \text{ et } \alpha = \varepsilon; \alpha^2 = -\lambda \text{ donc } \frac{-2m}{\hbar^2} E = \frac{e^4 m^2}{\hbar^4}$$

Ce qui implique :

$$E_1 = \frac{-e^4 m}{2\hbar^2} \quad (I-4-3)$$

En rapprochant cette expression de la formule bien connue de Bohr pour les niveaux d'énergie de Balmer.

$$E_n = \frac{-me^4}{2\hbar^2 n^2} \quad (I-4-4)$$

Posant $n = 1$, dans la formule de E_n , on obtient l'énergie de l'atome d'hydrogène dans l'état normal, prise avec le signe contraire elle est égale à l'énergie d'ionisation de l'atome d'hydrogène.

$$I = -E_1 = \frac{me^4}{2\hbar^2}$$

$$I = \frac{9.1 \times 10^{-31} \times (9 \times 10^9)^2 \times (1.6 \times 10^{-19})^4}{2 \times (1.05 \times 10^{-34})^2} \cong 13.6 \text{ eV}$$

Un nombre qui est en bonne concordance avec les données expérimentales.

La fonction de l'état fondamental $1s$ devient :

$$\psi_{1s} = \frac{1}{\pi^{1/2} a_1^{3/2}} e^{-\frac{r}{a_1}} \quad (I-4-5)$$

Le niveau d'énergie $n = 2$ admet quatre solutions dégénérées, à savoir l'orbitale $2s$ et les orbitales $2p_x$, $2p_y$, et $2p_z$.

$$\left\{ \begin{array}{l} \psi_{2s} = \frac{1}{4(2\pi)^{1/2} a_1^2} e^{-\frac{r}{2a_1}} \left(2 - \frac{r}{a_1} \right) \\ \psi_{2p_x} = \frac{1}{4(2\pi)^{1/2} a_1^2} e^{-\frac{r}{2a_1}} \times \frac{x}{a_1} \\ \psi_{2p_y} = \frac{1}{4(2\pi)^{1/2} a_1^2} e^{-\frac{r}{2a_1}} \times \frac{y}{a_1} \\ \psi_{2p_z} = \frac{1}{4(2\pi)^{1/2} a_1^2} e^{-\frac{r}{2a_1}} \times \frac{z}{a_1} \end{array} \right. \quad (I-4-6)$$

1.5. Distribution spatiale de la densité électronique.

Calculons maintenant la probabilité de présence de l'électron dans l'élément de volume $d\tau$.

La probabilité de présence de l'électron à une distance entre r et $r + dr$ est :

$$W(r)dr = |C|^2 r^2 e^{-2\varepsilon r} dr \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta = 4\pi |C|^2 r^2 e^{-2\varepsilon r} dr \quad (1-5-1)$$

il est évident que la constante ε doit avoir la dimension m^{-1} , en introduisant une nouvelle constante a_1 liée à ε par la relation $\varepsilon = \frac{1}{a_1}$.

Alors

$$W(r)dr = 4\pi |C|^2 r^2 e^{-\frac{2r}{a_1}} dr \quad (1-5-2)$$

$W(r)$ devient zéro pour $r \rightarrow 0$.

Avec $a_1 = \frac{1}{\varepsilon} = \frac{1}{\alpha} = \frac{\hbar^2}{me^2}$.

Avant tous il faut normaliser la fonction propre à l'unité.

$$1 = |C|^2 \int_0^{+\infty} r^2 e^{-\frac{2r}{a_1}} dr \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta = 4\pi |C|^2 \int_0^{+\infty} r^2 e^{-\frac{2r}{a_1}} dr \quad (1-5-3)$$

l'intégrale restée non calculée, prend la forme de $I_n = \int_0^{+\infty} r^n e^{-\beta r} dr$ pour $\beta = \frac{2}{a_1}$.

Le calcul de ces intégrales dans le cas général est donné par la formule suivante : $I_n = \frac{n!}{\beta^{n+1}}$

Donc, $\int_0^{+\infty} r^2 e^{-\frac{2r}{a_1}} dr = I_2 = \frac{2!}{(\frac{2}{a_1})^3} = \frac{a_1^3}{4}$,

après, $4\pi |C|^2 \int_0^{+\infty} r^2 e^{-\frac{2r}{a_1}} dr = 4\pi |C|^2 \frac{a_1^3}{4} = 1$, ce qui implique $|C| = \frac{1}{\sqrt{\pi a_1^3}}$

Et la fonction propre normée devient

$$\psi_{1s} = \frac{1}{\pi^{1/2} a_1^{3/2}} e^{-\frac{r}{a_1}} \quad (1-5-4)$$

1.6. Valeurs moyennes des grandeurs d'espace.

Dans ce cours, on va déterminer les valeurs moyennes correspondent au rayon atomique, à l'énergie potentielle et à l'énergie cinétique prises dans l'état ψ_{1s} de l'atome d'hydrogène.

1.6.1. Valeur moyenne du rayon atomique :

La valeur moyenne du rayon atomique dans l'état ψ_{1s} de l'atome d'hydrogène est définie comme suit :

$$\langle r \rangle_{\psi_{1s}} = \langle \psi_{1s} | r | \psi_{1s} \rangle = \int |\psi_{1s}|^2 r d\tau = \int_0^\infty W(r) r dr = \int_0^\infty \frac{4}{a_1^3} r^3 e^{-\frac{2r}{a_1}} dr$$

où, $I_n = \int_0^{+\infty} r^n e^{-\beta r} dr = \frac{n!}{\beta^{n+1}}$ avec $\beta = \frac{2}{a_1}$.

Ce qui implique : $\langle r \rangle_{\psi_{1s}} = \frac{4}{a_1^3} \frac{3!}{\left(\frac{2}{a_1}\right)^4} = \frac{3}{2} a_1$.

1.6.2. Valeur moyenne de l'énergie potentielle :

La valeur moyenne de l'énergie potentielle dans l'état ψ_{1s} de l'atome d'hydrogène est donnée par :

$$\langle U \rangle_{\psi_{1s}} = \langle \psi_{1s} | U | \psi_{1s} \rangle = - \int |\psi_{1s}|^2 \frac{e^2}{r} d\tau = - \int_0^\infty W(r) \frac{e^2}{r} dr = \frac{-4e^2}{a_1^3} \int_0^\infty r e^{-\frac{2r}{a_1}} dr$$

Donc : $\langle U \rangle_{\psi_{1s}} = \frac{-4e^2}{a_1^3} \frac{1}{\left(\frac{2}{a_1}\right)^2} = -\frac{e^2}{a_1}$.

1.6.3. Valeur moyenne de l'énergie cinétique :

L'énergie totale est la somme de l'énergie cinétique et l'énergie potentielle, donc :

$$E = T + U$$

La valeur moyenne de l'énergie totale dans l'état ψ_{1s} de l'atome d'hydrogène est aussi la somme des valeurs moyennes des énergies cinétique et potentielle prises dans l'état ψ_{1s} de l'atome d'hydrogène.

$$\langle E \rangle_{\psi_{1s}} = \langle T \rangle_{\psi_{1s}} + \langle U \rangle_{\psi_{1s}}$$

La valeur moyenne de l'énergie totale est égale à l'énergie totale elle-même, parce qu'elle ne dépend pas du rayon atomique (une constante).

Donc :

$$\langle T \rangle_{\psi_{1s}} + \langle U \rangle_{\psi_{1s}} = -\frac{me^4}{2\hbar^2} = -\frac{e^2}{2a_1}$$

$$\text{D'où, } \langle U \rangle_{\psi_{1s}} = -\frac{e^2}{a_1}$$

$$\text{Alors : } \langle T \rangle_{\psi_{1s}} = -\frac{e^2}{2a_1} - \langle U \rangle_{\psi_{1s}} = -\frac{e^2}{2a_1} + \frac{e^2}{a_1} = \frac{e^2}{2a_1}.$$

1.7. Parité d'un état hydrogénéoïde.

Abondons maintenant la solution du problème dans le système hydrogénéoïde (mouvement de l'électron dans le champ du noyau chargé positivement de charge $Z|\bar{e}|$). L'énergie potentielle qui lui correspond est :

$$U = -\frac{Ze^2}{r} \quad (1-7-1)$$

L'opérateur Laplacien s'écrit en coordonnées sphériques :

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (1-7-2)$$

La fonction d'onde ψ ne dépendra que du rayon vecteur \vec{r} et ne dépendra pas du θ et φ (symétrie sphérique complète).

L'équation de Schrödinger a la forme suivante,

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{Ze^2}{r} \right) \psi = 0 \quad (1-7-3)$$

Les notions simplifiées sont les suivantes :

$$\lambda = \frac{2m}{\hbar^2} E \quad \text{et} \quad \alpha = \frac{Ze^2 m}{\hbar^2}$$

Donc, l'équation prendra la forme suivante :

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \left(\lambda + \frac{2\alpha}{r} \right) \psi = 0 \quad (1-7-4)$$

La solution simple de cette équation ayant une valeur finie pour $r = 0$ et tendant vers zéro pour $r \rightarrow \infty$ est :

$$\psi = Ae^{-\varepsilon r} \quad (1-7-5)$$

Après simplification par $Ae^{-\varepsilon r}$, on obtiendra :

$$\varepsilon^2 - \frac{2}{r} \varepsilon + \left(\lambda + \frac{2\alpha}{r} \right) = 0 \quad (1-7-6)$$

Soit $\varepsilon^2 + \lambda + \frac{2}{r}(\alpha - \varepsilon) = 0$

$$\varepsilon^2 = -\lambda \text{ et } \alpha = \varepsilon ; \alpha^2 = -\lambda \text{ donc } \frac{-2m}{\hbar^2} E = \frac{Z^2 e^4 m^2}{\hbar^4}$$

Ce qui implique :

$$E_1(Z) = \frac{-Z^2 e^4 m}{2\hbar^2} \quad (1-7-7)$$

Il faut normaliser la fonction propre ψ à l'unité.

$$\int \psi^* \psi d\tau = |A|^2 \int_0^{+\infty} r^2 e^{-\frac{2Zr}{a_1}} dr \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta = 4\pi |A|^2 \int_0^{+\infty} r^2 e^{-\frac{2Zr}{a_1}} dr = 4\pi |A|^2 \frac{2!}{\left(\frac{2}{a_1}\right)^3} = 1$$

Ensuite ; $|A| = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_1}\right)^{3/2}$ et la fonction d'onde pour l'état stationnaire $1s$ a la forme suivante :

$$\psi_{1s}(Z) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_1}\right)^{3/2} e^{-\frac{Zr}{a_1}} \quad (1-7-8)$$

Avec $a_1 = \frac{\hbar^2}{me^2}$.

Les quatre fonctions d'onde du niveau d'énergie $n = 2$, à savoir l'orbitale $2s$ et les orbitales $2p_x$, $2p_y$, et $2p_z$ sont les suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{l} \psi_{2s}(Z) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_1}\right)^{3/2} e^{-\frac{r}{2a_1}} \left(2 - \frac{Zr}{a_1}\right) \\ \psi_{2p_x}(Z) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_1}\right)^{3/2} e^{-\frac{r}{2a_1}} \times \frac{Zx}{a_1} \\ \psi_{2p_y}(Z) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_1}\right)^{3/2} e^{-\frac{r}{2a_1}} \times \frac{Zy}{a_1} \\ \psi_{2p_z}(Z) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_1}\right)^{3/2} e^{-\frac{r}{2a_1}} \times \frac{Zz}{a_1} \end{array} \right. \quad (1-7-9)$$

Exercices**Exercice 01 :**

Soit un atome d'hydrogène constitué d'un électron tournant autour d'un proton supposé immobile :

1. Calculer l'énergie de ce système en fonction de la distance électron-proton. On posera : $q^2 = e^2/4\pi\epsilon_0$.
2. En écrivant la quantification de l'action, en déduire la nouvelle expression de l'énergie qui en découle.
3. Déterminer la fréquence des photons émis ou absorbés par l'atome lors de transition entre deux niveaux.

Exercice 02 :

Un atome d'hydrogène est constitué d'un électron tournant autour d'un proton supposé immobile :

1. Montrer que le moment cinétique de l'électron par rapport au proton est constant au cours du temps. Que peut-on conclure ?
2. L'électron décrit un mouvement circulaire uniforme autour du proton. En déduire la distance électron-proton sachant que le module du moment cinétique s'écrit : $|\vec{L}| = \hbar k$.
3. En utilisant la quantification de l'action ainsi que le bilan des forces appliquées à l'électron, déterminer la distance électron-proton.
4. Dans quelles conditions les résultats des questions 2 et 3 sont-ils compatibles ?

Exercice 03 :

Soit un électron décrivant un mouvement circulaire uniforme autour d'un proton immobile :

1. Déterminer la position et la vitesse de l'électron ainsi que l'énergie de ce système en fonction du nombre quantique principal n introduit par la quantification de l'action.
2. Calculer les grandeurs précédentes pour le premier niveau ($n = 1$) On donne :
 $e = 1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$, $m_e = 9.1 \times 10^{-31} \text{ kg}$, $h = 6.62 \times 10^{-34} \text{ J.s}$ et $1/4\pi\epsilon_0 = 9 \times 10^9 \text{ (SI)}$.
3. Retrouver la règle des combinaisons de Ritz et calculer la constante de Rydberg R .

Exercice 04 :

Par un processus d'ionisation, on arrache ($Z-1$) électrons à un atome dont le noyau est Z fois chargé. L'ion ainsi constitué possède un seul électron lié au noyau : un tel système constitue un ion hydrogénéoïde. On cherche à déterminer les caractéristiques de cet ion en traitant le problème comme un atome d'hydrogène dont le noyau porte Z charges positive:

1. Déterminer l'énergie du système, on supposera que le noyau est en mouvement.
2. L'électron tournant autour du noyau avec une vitesse uniforme, exprimer l'énergie totale en fonction de la distance r électron-proton et du paramètre $q^2 = e^2/4\pi\epsilon_0$.
3. En écrivant la quantification de l'action, en déduire la quantification de l'énergie, du rayon et de la vitesse de l'électron.
4. Retrouver la règle des combinaisons de Ritz, en déduire la constante de Rydberg dans le cas des ions hydrogénéoïdes.

Solutions

Solution 01 :

1. L'énergie totale s'écrit : $E = -q^2/2r$.
2. On utilise la quantification de l'action : $\int \vec{p} \times \vec{dl} = nh$; $2\pi r m v = nh$; donc $mvr = n\hbar$.
Le bilan des forces conduit à : $\frac{q^2}{r^2} = m \frac{v^2}{r}$.
Le rayon est donc : $r_n = n^2 \frac{\hbar^2}{mq^2}$, et l'énergie devient : $E_n = -\frac{mq^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}$.
3. Les photons étant émis ou absorbés lors de transitions entre niveaux d'énergie quantifiés, on a : $h\nu = E_{n_2} - E_{n_1} = \frac{mq^4}{2\hbar^2} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$, soit encore : $\nu = \frac{mq^4}{4\pi\hbar^3} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$.

Solution 02 :

1. Le moment cinétique s'écrit : $\vec{L} = \vec{r} \times m\vec{v}$,
Après dérivation, on obtient : $\frac{d\vec{L}}{dt} = \frac{d\vec{r}}{dt} \times m\vec{v} + \vec{r} \times m \frac{d\vec{v}}{dt} = \vec{v} \times m\vec{v} + \vec{r} \times \vec{F} = 0$
Parce que la force coulombienne étant centrale (colinéaire au rayon).
Le moment cinétique \vec{L} est constant en module et en direction au cours du temps : le mouvement est plan.
2. Le bilan des forces conduit à : $\frac{q^2}{r^2} = m \frac{v^2}{r}$. La vitesse s'exprime : $v = \frac{L}{mr}$, on obtient le rayon : $r = \frac{L^2}{mq^2} = k^2 \frac{\hbar^2}{mq^2}$.
3. Le bilan des forces et la quantification de l'action conduit à : $E_n = -\frac{mq^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}$.
4. Pour que les résultats précédentes soient compatibles, il faut que : $n = k$.

Solution 03 :

1. Le bilan des forces et la quantification de l'action conduit à : $r_n = n^2 \frac{\hbar^2}{mq^2}$; $v_n = \frac{n\hbar}{mr}$, soit encore $v_n = \frac{q^2}{\hbar} \frac{1}{n}$, on obtient également : $E_n = -\frac{mq^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}$.
2. Pour le premier niveau : $r_1 = \frac{\hbar^2}{mq^2} = 0.53 \text{ \AA}$; $v_1 = \frac{\hbar}{mr} = 2.19 \times 10^6 \text{ m/s}$; $E_1 = -\frac{mq^4}{2\hbar^2} = -2.18 \times 10^{-18} \text{ J} = -13.6 \text{ eV}$.
3. On écrit $h\nu = E_{n_2} - E_{n_1} = \frac{mq^4}{2\hbar^2} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$,

On retrouve la règle de combinaison de Ritz en utilisant la relation :

$\nu = \frac{c}{\lambda}$, soit : $\frac{1}{\lambda} = \frac{mq^4}{4\pi\hbar^3c} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$, on pose $R = \frac{mq^4}{4\pi\hbar^3c}$, d'où : $\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$, R est la constante de Rydberg.

Solution 04 :

1. L'énergie totale est : $E = \frac{1}{2}\mu v^2 - Z \frac{q^2}{r}$. avec μ la masse réduite.
2. Le bilan des forces donne : $Z \frac{q^2}{r^2} = \mu \frac{v^2}{r}$, d'où $\mu v^2 = Z \frac{q^2}{r}$. L'énergie totale devient : $E = -Z \frac{q^2}{2r}$.
3. On applique la quantification de l'action, on aura :

$$r_n = n^2 \frac{\hbar^2}{\mu Z q^2} ; v_n = \frac{Z q^2}{\hbar} \frac{1}{n} ; E_n = -\frac{\mu Z^2 q^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}.$$

4. En écrivant que les photons sont émis ou absorbés lors de transitions entre deux niveaux d'énergie : $h\nu = E_{n_2} - E_{n_1} = \frac{\mu Z^2 q^4}{2\hbar^2} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$, la règle de combinaison de Ritz est donnée par :

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{\mu Z^2 q^4}{4\pi\hbar^3c} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

En posant, $R_N = \frac{\mu q^4}{4\pi\hbar^3c} = \frac{R}{\left(1 + \frac{m_e}{M_N}\right)}$.

Chapitre II

Les atomes à plusieurs électrons

II.1. Introduction.

Ce chapitre traite l'atome à plusieurs électrons en adoptant le modèle en couche pour un atome quelconque ; ensuite, on va étudier en particulier les atomes alcalins et l'atome d'hélium par le traitement quantique.

II.2. Le modèle en couche.

Voyons maintenant la théorie de classification des éléments et commençons par un énoncé des principes sur lesquels cette théorie s'appuie.

II.2.1. Nombres quantiques.

L'état énergétique de l'électron dans l'atome est toujours caractérisé par quatre nombres quantiques. On sait cependant que dans un système composé du noyau et des électrons interagissant suivant la loi de Coulomb en absence de champ, tous les états aux nombres quantiques identiques n , l , j , et m_j coïncident entre eux (dégénérescence), cette dégénérescence disparaît dans un champ magnétique ; en outre, si ce champ est faible, chaque niveau de valeur donnée j se décompose en $2j+1$ états (sous-niveaux). Un champ intense, par contre rompt la liaison entre les vecteurs, le nombre quantique j perd son sens, l'état se caractérise par un système de nombres quantiques n , l , m_l , m_s . Pour tenir compte de tous les états possibles, on admettra que l'atome se trouve dans un champ magnétique suffisamment intense.

II.2.2. Principe de Pauli et classification idéale des éléments.

Ce principe dont les bases théoriques ont été exposées sera énoncé pour le cas qui nous intéresse de la façon suivante : « Il ne peut exister dans l'atome qu'un seul électron dans l'état caractérisé par les valeurs données des quatre nombres quantiques, c'est-à-dire, deux électrons liés dans un même atome doivent différer par les valeurs d'un moins un nombre quantique ».

On verra à l'instant que le principe de Pauli limite rigoureusement le nombre d'électrons liés dans un même atome et possèdent trois, deux nombres quantiques identiques ou un nombre quantique donnée.

Etablissons avant tout le nombre d'électrons dans un atome avec trois nombres quantiques identiques n , l , et m_l . Ces électrons doivent avoir des valeurs différentes du quatrième nombre quantique m_s , mais m_s ne peut prendre que deux valeurs possibles $+1/2$ et $-1/2$. Bref, il ne peut y avoir dans l'atome que deux électrons à trois nombres quantiques n , l , et m_l identiques.

Si on fixe deux nombres quantiques n et l , pour une valeur de l donnée, le nombre quantique m_l peut avoir $2l+1$ valeurs différentes, donc dans l'atome il peut y avoir simultanément $2(2l+1)$ électrons avec deux nombres quantiques n et l identiques.

$l = 0$, 2 électrons s .

$l = 1$, 6 électrons p .

$l = 2$, 10 électrons d .

Voyons maintenant combien il peut y avoir dans l'atome d'électrons possédant un même nombre quantique principal n . Pour une valeur donnée n , les électrons peuvent différer tout d'abord par leur nombre quantique l prenant les valeurs $0, 1, \dots, n-1$. Donc le nombre maximal d'électrons à un même nombre quantique principal s'exprimera par la somme :

$$\sum_0^{n-1} 2(2l + 1) = 2(1 + 3 + 5 + \dots) = 2n^2 \quad (\text{II-2-1})$$

Ces électrons peuvent être dans l'atome au nombre de 2 pour le même nombre quantique principal $n = 1$, au nombre de 8 pour $n = 2$, de 18 pour $n = 3$, etc..

Tableau II.1 : Le nombre d'électrons maximal dans une couche et une enveloppe.

n	$l = 0, 1, 2, 3, 4$ s, p, d, f, g	Nombre maximal d'électrons
1	2	2
2	2 + 6	8
3	2 + 6 + 10	18
4	2 + 6 + 10 + 14	32
5	2 + 6 + 10 + 14 + 18	50

L'ensemble des électrons possédant un même nombre quantique principal forme une couche. L'ensemble des électrons possédant les mêmes n et l forme une enveloppe (sous-couche).

n	1	2	3	4	5
Couche	K	L	M	N	O

Ces électrons remplissent peu à peu la couche au même nombre quantique principal n , quand leur nombre atteint la valeur maximale pour un n donné, c'est-à-dire, $2n^2$, le remplissage de la couche s'achève et on obtient une structure stable, l'électron suivant commence déjà à remplir une nouvelle couche.

La classification périodique idéale selon le principe de Pauli devrait posséder la structure et les longueurs des périodes indiquées au Tableau II.1. Rapprochons de cette structure idéale des éléments, le tableau réel de Mendeleïev est sous une forme commode aux desseins poursuivis : chaque série de gauche débute par un métal alcalin et s'achève à droite par un gaz noble. Le nombre d'électrons dans la couche : 2, 8, 8, 18, 18, 32 correspond à la formule $2n^2$ mais la succession de ces nombres ne coïncide pas avec celle du tableau idéal (Tableau II.1).

II.2.3. Structure des différents périodes du tableau périodique de D. Mendeleïev.

La raison de la non-concordance des tableaux idéal et réel des éléments réside dans ce que le premier s'appuyait sur des hypothèses trop idéalisées.

Le travail d'édification du tableau périodique de remplissage des couches et des sous-couches est dérogé. Le premier électron sera lié au nombre quantique principal $n = 1$ et au nombre quantique azimutal $l = 0$, c'est-à-dire l'état $1s$. De façon infiniment lente, rapprochons de l'atome un seconde électron, on obtiendra l'atome neutre de l'hélium, le second électron sera lié dans l'état $1s$. En augmentant la charge encor de l'unité et en rapprochant un troisième électron on obtiendra l'atome de lithium, l'état énergétique possible le plus voisin et l'état $2s$ ($n = 2, l = 0$).

II.2.3.1. Règle de Klechkowski.

Cette règle permet d'édifie le tableau périodique de Mendeleïev.

~~1s~~
~~2s 2p~~
~~3s 3p 3d~~
~~4s 4p 4d 4f~~
~~5s 5p 5d 5f ...~~
~~6s 6p 6d~~

II.3. Les atomes alcalins.

II.3.1. Le modèle de Slater.

Le modèle de Slater est une approximation permettant de prendre en compte la répulsion inter-électronique présente dans les atomes et ions poly-électroniques.

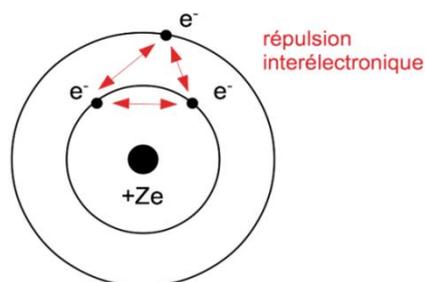


Fig. II.3.1: Schéma d'un atome alcalin.

Le but de ce modèle est :

1. D'obtenir des fonctions d'onde approximatives acceptables.
2. Calculer de façon simple l'énergie des atomes et ions poly-électroniques.
3. Déduire d'autres grandeurs comme les énergies d'ionisation successives.

Le modèle de Slater prend en compte de façon indirecte la répulsion inter-électronique, à travers une notion d'*écranage* du noyau par certains électrons.

II.3.1.1. Le modèle de Slater des atomes et des ions poly-électroniques.

Tous se passe comme si chaque électron étant seul mais soumis à une attraction moindre que la part du noyau, exprimée par une charge effective $Z_{eff}e < Ze$. Un tel problème mono-électronique est analogue à un hydrogénoïde, pour lequel les énergies sont connues.

Les électrons écrantants : L'écranage est exercé uniquement par les électrons plus internes ou sur la même couche que l'électron considéré ; les autres électrons, situés en moyenne plus loin que lui par rapport au noyau, n'écrantent pas l'électron considéré.

Les électrons *écranants* sont ceux qui s'interposent entre le noyau et l'électron considéré.

Exemple :

- 1)- Les électrons $1s$ écrantent les électrons $2s$ et $3s$.
- 2)- Les électrons $1s$ et $2s$, $2p$ écrantent les $3s$ (qui s'écrantent aussi entre eux).

II.3.1.2. Le modèle de Slater appliqué aux atomes alcalins (exemple de l'atome de lithium).

Un électron $1s$ est écranté par son voisin $1s$ sur la même couche que lui. On néglige l'écrantage exercé par l'électron $2s$, situé plus loin. L'électron $2s$, ici seul sur sa couche, est écranté par les électrons $1s$ situés sur la couche inférieure.

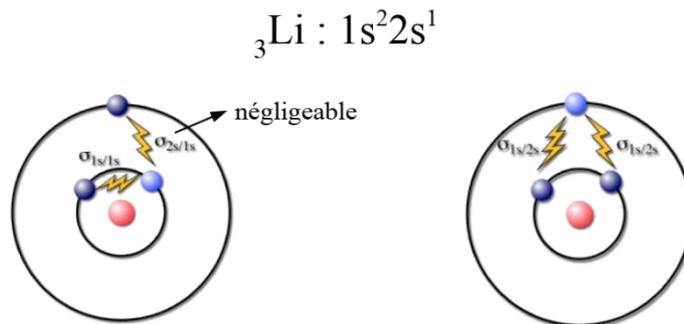


Fig. II.3.2: L'écrantage dans l'atome de lithium.

II.3.1.3. Règles de Slater.

1. Slater définit des groupes d'électrons écrantants : $1s$, $(2s, 2p)$, $(3s, 3p)$, $3d$, $(4s, 4p)$ etc. chacun exerçant le même écrantage.
2. Pour l'électron (i) écranté considéré, sur la couche n_i , Slater calcule une constante d'écran $\sigma_{ij} = \sigma_{j \rightarrow i}$ qu'il ressent de la part de chaque électron (j) écrantant :
 - Electrons (j) de la couche $n-2$: écran $\sigma_{ij} = 1$.
 - Electrons (j) de la couche $n-1$: écran $\sigma_{ij} = 0,85$ si (i) est s ou p , $\sigma_{ij} = 1$ si (i) est d ou f .
 - Electrons (j) de la même couche : écran $\sigma_{ij} = 0,35$ (sauf $1s$: $0,30$).
 - Electrons (j) de couches supérieures : écrantage négligé.
 - Slater utilise un nombre quantique effectif n^* pour le calcul des énergies.

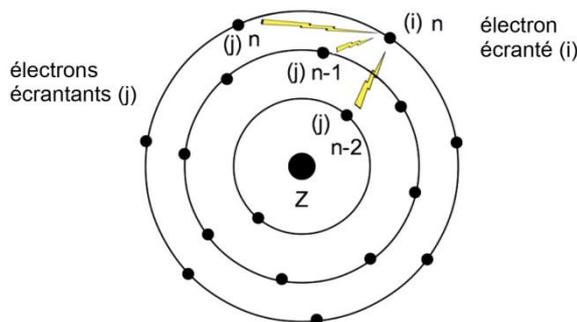


Fig. II.3.3: L'écrantage dans un atome quelconque.

L'écran total σ_i ressenti par un électron est la somme des constantes d'écran de chaque électron écrantant calculée à l'aide de la table des constantes d'écran de Slater.

$$\sigma_i = \sum_{j \leq i} \sigma_{j \rightarrow i} \quad (\text{II-3-1})$$

Du fait de l'écrantage exercé par certains électrons, chaque électron ressent une attraction moindre de la part du noyau. Tout se passe comme si le noyau était moins chargé : $Z_{eff}e < Ze$.

Slater définit une charge nucléaire effective :

$$Z_{eff} = Z - \sigma_i \quad (\text{II-3-2})$$

Tableau II.2 : Table des constantes d'écran $\sigma_{ij} = \sigma_{j \rightarrow i}$.

Electron « écranté » i	Ecran dû à un électron j					
	1s	2s, 2p	3s, 3p	3d	4s, 4p	4d
1s	0,30					
2s, 2p	0,85	0,35				
3s, 3p	1	0,85	0,35			
3d	1	1	1	0,35		
4s, 4p	1	1	0,85	0,85	0,35	
4d	1	1	1	1	1	0,35

Pour le cas de l'atome du lithium :

L'électron 1s est écranté par son unique voisin l'électron 1s, la charge effective Z^*_{1s} ressentie par un électron 1s est : $Z^*_{1s} = Z - \sigma_{1s \rightarrow 1s} = 3 - 0,30 = 2,70$.

L'électron 2s est écranté par les deux électrons 1s, la charge effective Z^*_{2s} ressentie par un électron 2s est : $Z^*_{2s} = Z - \sigma_{1s \rightarrow 2s} = 3 - 2 \times 0,85 = 1,30$.

II.3.1.4. Energie d'une orbitale atomique et énergie de l'atome.

II.3.1.4.1. Energie d'une orbitale atomique.

C'est une énergie d'un système « hydrogénoïde » fictif avec un électron (i) et un noyau chargé $Z_{eff(i)}e$. Celle d'un électron i occupant cette orbitale atomique et ayant le nombre quantique n_i .

$$E_{(i)} = -R_y \frac{Z_{eff(i)}^2}{n_i^2} \quad (II-3-3)$$

Avec $R_y = 13.6 \text{ eV}$

II.3.1.4.2. Energie totale de l'atome.

Est la somme des énergies de tous les électrons (i) de l'atome.

$$E_{atom} = \sum_i E_{(i)} \quad (II-3-4)$$

Pour le cas de l'atome du lithium :

L'énergie d'un électron 1s est : $E_{1s} = -13.6 \frac{Z_{eff(i)}^2}{1^2} = -13.6 \frac{2.70^2}{1^2} = -99.1 \text{ eV}$.

L'énergie d'un électron 2s est : $E_{2s} = -13.6 \frac{Z_{eff(i)}^2}{2^2} = -13.6 \frac{1.30^2}{2^2} = -5.7 \text{ eV}$

L'énergie totale de l'atome de lithium est donc :

$$E(Li) = 2E_{1s} + E_{2s} = 2 \times (-99.1) + (-5.7) = -204.0 \text{ eV}$$

II.4. L'atome d'hélium.

Profitions de la théorie des perturbations pour la solution du problème de l'état normal ou fondamental de l'atome d'hélium et des ions assimilés. Si on tient compte de l'interaction des électrons, l'énergie potentielle de l'hélium et des ions assimilés est égale à :

$$U = \frac{-Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2} + \frac{e^2}{|\vec{r}_{12}|} \quad (\text{II-4-1})$$

Avec $|\vec{r}_{12}| = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$

L'opérateur énergie (le Hamiltonien) associé à l'énergie totale est :

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_2 - \frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2} + \frac{e^2}{|\vec{r}_{12}|} \quad (\text{II-4-2})$$

Tandis que, l'équation de Schrödinger où figure cet opérateur devient :

$$(\Delta_1 + \Delta_2)\psi + \frac{2m_e}{\hbar^2} \left(E + \frac{Ze^2}{r_1} + \frac{Ze^2}{r_2} - \frac{e^2}{|\vec{r}_{12}|} \right) \psi = 0 \quad (\text{II-4-3})$$

Avec $\psi = \psi(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2)$

Si on néglige ici le terme correspondant à l'énergie d'interaction des électrons, c'est-à-dire le terme $\frac{e^2}{|\vec{r}_{12}|}$, l'équation de Schrödinger restante se divise et on obtient pour chaque électron l'équation de la forme :

$$\Delta_k \psi_k + \frac{2m_e}{\hbar^2} \left(E_k + \frac{Ze^2}{r_k} \right) \psi_k = 0 \quad ; \text{ avec } k = 1 \text{ ou } 2 \quad (\text{II-4-4})$$

C'est l'équation de Schrödinger examinée pour le problème de Kepler, d'où ses valeurs propres et ses fonctions propres sont connues dans l'état normal ($n = 1$).

L'énergie totale est :

$$E_1 = -\frac{m_e Z^2 e^4}{2\hbar^2} \quad (\text{II-4-5})$$

Et l'état fondamental (normal) est l'état $1s$, sa fonction propre est :

$$\psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_1} \right)^{3/2} \exp^{-\sigma} \quad (\text{II-4-6})$$

$$\text{Où } \sigma = \frac{Z}{a_1} r$$

L'énergie de tous le system est égale à la somme des énergies partielles

$$E_0 = 2E_1 = -\frac{m_e Z^2 e^4}{\hbar^2} \quad (\text{II-4-7})$$

Et la fonction propre est le produit des fonctions ψ_{1s} pour $r = r_1$ et $r = r_2$.

$$\psi = \frac{1}{\pi} \left(\frac{Z}{a_1}\right)^3 \exp\left(-\frac{Z}{a_1} r_1\right) \times \exp\left(-\frac{Z}{a_1} r_2\right) \quad (\text{II-4-8})$$

On note que $\rho = \frac{2Z}{a_1} r$

Alors :

$$\psi = \frac{1}{\pi} \left(\frac{Z}{a_1}\right)^3 \exp\left(-\frac{\rho_1}{2}\right) \times \exp\left(-\frac{\rho_2}{2}\right) \quad (\text{II-4-9})$$

L'approximation d'ordre zéro montre que le problème est complètement résolu.

Pour résoudre le problème en première approximation, considérons l'énergie potentielle de l'interaction des électrons $\frac{e^2}{|\vec{r}_{12}|}$ comme une perturbation.

La correction à l'énergie en première approximation est égale à la valeur moyenne du terme perturbateur prise sur l'état non-perturbé, c'est-à-dire :

$$E' = \int \frac{e^2}{|\vec{r}_{12}|} |\psi|^2 d\tau \quad (\text{II-4-10})$$

Où l'élément de volume de l'espace à six dimensions, $d\tau$ en coordonnées sphériques est égale à :

$$d\tau = r_1^2 \sin \theta_1 dr_1 d\theta_1 d\varphi_1 \times r_2^2 \sin \theta_2 dr_2 d\theta_2 d\varphi_2 \quad (\text{II-4-11})$$

On utilisera dans la suite pour le calcul au lieu de r_k les valeurs ρ_k formées suivant les formules :

$$r_{12} = \frac{a_1}{2Z} \rho_{12} ; r_1 = \frac{a_1}{2Z} \rho_1 ; \text{ et } r_2 = \frac{a_1}{2Z} \rho_2 \quad (\text{II-4-12})$$

L'élément de volume devient :

$$d\tau = \left(\frac{a_1}{2Z}\right)^6 \rho_1^2 \sin \theta_1 d\rho_1 d\theta_1 d\varphi_1 \times \rho_2^2 \sin \theta_2 d\rho_2 d\theta_2 d\varphi_2 \quad (\text{II-4-13})$$

On obtient alors :

$$E' = \left(\frac{a_1}{2Z}\right)^6 \left(\frac{e^2 Z^6}{\pi^2 a_1^6}\right) \left(\frac{2Z}{a_1}\right) \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \frac{\exp^{-(\rho_1+\rho_2)}}{\rho_{12}} \rho_1^2 \sin \theta_1 d\rho_1 d\theta_1 d\varphi_1 \times \rho_2^2 \sin \theta_2 d\rho_2 d\theta_2 d\varphi_2 \quad (\text{II-4-14})$$

L'intégrale sextuple figurant dans cette formule est égale à $20\pi^2$. On a donc :

$$E' = \frac{Ze^2}{2^5 \pi^2 a_1} \times 20\pi^2 = \frac{Ze^2}{2a_1} \times \frac{5}{4} = \frac{5 m_e Z e^4}{4 2h^2} = \frac{5}{4} Z E_H \quad (\text{II-4-15})$$

Avec : $a_1 = \frac{\hbar^2}{mZe^2}$.

Où $E_H = \frac{m_e e^4}{2\hbar^2}$ est l'énergie d'ionisation du premier niveau de l'atome d'hydrogène pour $Z = 1$ et $n = 1$.

Ainsi donc, l'énergie de l'état normal de l'atome d'hélium en première approximation est égale à :

$$E = E_0 + E' = -\frac{m_e Z^2 e^4}{\hbar^2} + \frac{5 m_e Z e^4}{4 2h^2} = -(2Z^2 - \frac{5}{4} Z) E_H \quad (\text{II-4-16})$$

Avec $E_H = 13.60$ eV.

Cette formule permet donc d'évaluer l'énergie du premier niveau de l'atome d'hélium ($Z = 2$) ou des ions assimilés ($Z = 3, 4, \dots$), cette énergie est prise avec un signe moins (-), est évidemment égale au contraire de l'énergie d'ionisation totale.

On donne au Tableau II.3 des valeurs permettant de faire le rapprochement avec les résultats de l'expérience.

Tableau II.3 : Valeurs observées et calculées de l'énergie d'ionisation (en eV).

Ion assimilé à l'atome	$-E_{exp}$	$-E_0$	$-(E_0 + E')$
------------------------	------------	--------	---------------

d'hélium			
He	78.62	108.24	74.42
Li ⁺	197.14	243.54	192.80
Be ⁺⁺	369.96	432.96	365.31
B ⁺⁺⁺	596.4	676.50	591.94
C ⁺⁺⁺⁺	876.2	974.16	872.69

Exercices

Exercice 01 :

Soit un atome de Z électrons. On cherche la répartition des électrons sur les différents niveaux :

1. Combien peut-on mettre d'électrons sur une couche ?
2. Combien peut-on mettre d'électrons sur une sous-couche ?
3. On considère un atome à 5 électrons. Représenter graphiquement (avec les spins) leur répartition sur les sous-niveaux dans la configuration d'énergie minimum.

Exercice 02 :

Déterminer les états fondamentaux des éléments suivants :

Élément	H	He	Li	Be	B
Z	1	2	3	4	5

On représentera graphiquement, dans chaque cas, la répartition des électrons sur les différents sous-niveaux. On précisera la configuration électronique ainsi que l'état dans les notions spectroscopiques.

Exercice 03 :

On considère un atome d'hélium d'un noyau Ze et de deux électrons:

1. En supposant le noyau immobile, écrire l'équation aux valeurs propres du hamiltonien.
2. Montrer, quand on néglige l'énergie d'interaction entre les deux électrons, que la fonction propre solution de l'équation précédente, s'écrit sous la forme d'un produit de deux fonctions.
3. On considère un premier groupe de solutions en posant :

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = f(r_1)f(r_2)$$

Où r_1 et r_2 sont les modules des vecteurs \vec{r}_1 et \vec{r}_2 .

Déduire les équations dont $f(r_1)$ et $f(r_2)$ sont solutions.

4. en pose:

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = Ae^{-Z(r_1+r_2)/a}$$

Déterminer l'énergie correspondant à chaque solution ainsi que a .

Exercice 04 :

On considère un atome d'hélium constitué d'un noyau de charge Ze et de deux électrons:

1. Ecrire le Hamiltonien du système en supposant le noyau immobile.
2. On montre que l'énergie totale est obtenue en calculant :

$$\iint_{V_1, V_2} \Psi^* (\vec{r}_1, \vec{r}_2) \hat{H} \Psi (\vec{r}_1, \vec{r}_2) d\tau_1 d\tau_2$$

Avec les conditions de normalisation :

$$\iint_{V_1, V_2} \Psi^* (\vec{r}_1, \vec{r}_2) \Psi (\vec{r}_1, \vec{r}_2) d\tau_1 d\tau_2 = 1$$

Exprimer l'énergie sous la forme d'une somme d'intégrales.

3. Un groupe de solutions s'écrit $\Psi (\vec{r}_1, \vec{r}_2) = A e^{-Z(r_1 + r_2)/a}$ avec $a = \frac{\hbar^2}{mq^2}$.

Calculer les intégrales précédentes, on donne, pour le terme d'interaction entre électrons, le résultat suivant :

$$\iint_{V_1, V_2} \Psi^* (\vec{r}_1, \vec{r}_2) \frac{q^2}{r} \Psi (\vec{r}_1, \vec{r}_2) d\tau_1 d\tau_2 \approx \frac{5}{8} Z \frac{mq^4}{\hbar^2}$$

On rappelle que : $\int_0^\infty r^n e^{-cr} dr = \frac{n!}{c^{n+1}}$ et $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{L^2}{\hbar^2 r^2}$ où L est l'opérateur de moment cinétique n'agissant que sur les coordonnées angulaires ϑ et φ .

4. Montrer que l'énergie totale peut encore s'écrire, en première approximation:

$$-(Z - \sigma_n)^2 \frac{mq^4}{\hbar^2}.$$

Où σ_n est la constante d'écran que l'on déterminera.

Solutions

Solution 01 :

1. On peut mettre sur un niveau n quelconque $g_n = 2n^2$ électrons, soit :

n	Couche	g_n
1	K	2
2	L	8
3	M	18
4	N	32
5	O	50

2. On peut mettre sur un sous-niveau l quelconque $g_{n,l} = 2(2l+1)$ électrons, soit :

l	Sous-couche	g_n
0	s	2
1	p	6
2	d	10
3	f	14
4	g	18

3. On a pour un atome à cinq électrons :

Pour $l=0$, $m_l = 0$, $m_s = -1/2$ et $m_s = +1/2$.

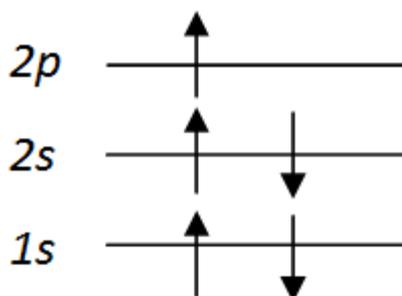
Les deux premiers électrons : $(n, l, m_l, m_s) \equiv (1, 0, 0 + \frac{1}{2})$ et $(1, 0, 0 - \frac{1}{2})$.

Pour $l=1$, $m_l = -1, 0, 1$; $m_s = -1/2$ et $m_s = +1/2$.

Les deux deuxième électrons : $(n, l, m_l, m_s) \equiv (2, 1, -1 - \frac{1}{2})$ et $(2, 1, -1 + \frac{1}{2})$.

Le dernier électron : $(n, l, m_l, m_s) \equiv (2, 1, 0, +\frac{1}{2})$.

La représentation graphique :



Solution 02 :

1-Hydrogène : $Z = 1$.

$$s = 1/2, 2s + 1 = 2$$

$$n = 1, 0 \leq l \leq n - 1 \rightarrow l = 0, \text{ l'état S.}$$

$$|l - s| \leq j \leq l + s \rightarrow 1/2 \leq j \leq 1/2, \text{ donc } j = 1/2.$$

Notation : ${}^2S_{1/2}$.

Configuration : $1s^1$.

2-Hélium : $Z = 2$.

$$S = 0, 2S + 1 = 1 \text{ (Antiparallèles)}$$

$$n = 1, 0 \leq l \leq n - 1 \rightarrow l = 0 \text{ pour chaque électron} \rightarrow L = 0, \text{ l'état S.}$$

$$|L - S| \leq J \leq L + S \rightarrow 0 \leq J \leq 0, \text{ donc } J = 0.$$

Notation : 1S_0 .

Configuration : $1s^2$.

3-Lithium : $Z = 3$.

$$S = 1/2, 2S + 1 = 2 \text{ (Deux électrons antiparallèles)}$$

$$n = 1, 0 \leq l \leq n - 1 \rightarrow l = 0 \text{ pour deux électrons.}$$

$$n = 2, 0 \leq l \leq n - 1 \rightarrow l = 0 \text{ pour le troisième électron} \rightarrow L = 0, \text{ l'état S.}$$

$$|L - S| \leq J \leq L + S \rightarrow 1/2 \leq J \leq 1/2, \text{ donc } J = 1/2.$$

Notation : ${}^2S_{1/2}$.

Configuration : $1s^2 2s^1$.

4-Béryllium : $Z = 4$.

$$S = 0, 2S + 1 = 1 \text{ (électrons antiparallèles deux à deux)}$$

$$n = 1, 0 \leq l \leq n - 1 \rightarrow l = 0 \text{ pour deux électrons.}$$

$$n = 2, 0 \leq l \leq n - 1 \rightarrow l = 0 \text{ pour les deux autres électrons} \rightarrow L = 0, \text{ l'état S.}$$

$$|L - S| \leq J \leq L + S \rightarrow 0 \leq J \leq 0, \text{ donc } J = 0.$$

Notation : 1S_0 .

Configuration : $1s^2 2s^2$.

5-Bore : $Z = 5$.

$$S = 1/2, 2S + 1 = 2 \text{ (deux paires de spins antiparallèles)}$$

$$n = 1, 0 \leq l \leq n - 1 \rightarrow l = 0 \text{ pour deux électrons.}$$

$$n = 2, 0 \leq l \leq n - 1 \rightarrow l = 0 \text{ pour les deux autres électrons.}$$

$l = 1$ pour le cinquième électron, donc $L = 0 + 1 = 1$, l'état P.

$|L - S| \leq J \leq L + S \rightarrow 1/2 \leq J \leq 3/2$, donc $J = \frac{1}{2}$, et $J = \frac{3}{2}$.

Notation : ${}^2P_{1/2}$, et ${}^2P_{3/2}$.

Configuration : $1s^2 2s^2 2p^1$.

Solution 03 :

1. L'équation de Schrödinger est :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_2 - z \frac{q^2}{r_1} - z \frac{q^2}{r_2} + \frac{q^2}{r} \right) \psi = E\psi$$

avec $r = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$ et $q^2 = e^2/4\pi\epsilon_0$.

2. L'énergie d'interaction étant négligée :

Le hamiltonien devient : $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_2 - z \frac{q^2}{r_1} - z \frac{q^2}{r_2} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2$ avec $\hat{H}_1 = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_1 - z \frac{q^2}{r_1}$ et $\hat{H}_2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_2 - z \frac{q^2}{r_2}$

3. Les deux équations aux valeurs propres : $\frac{\partial^2 f}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial f}{\partial r} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + Z \frac{q^2}{r} \right) f(r) = 0$. où r désigne r_1 ou r_2 .

4. L'énergie totale est : $E_1 + E_2 = 2E = -Z^2 \frac{mq^4}{\hbar^2}$.

Solution 04 :

1. Le hamiltonien total est : $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_2 - z \frac{q^2}{r_1} - z \frac{q^2}{r_2} + \frac{q^2}{r}$.

2. L'énergie totale est donnée par : $E = E_1 + E_2 + E_3 + E_4 + E_5$.

Avec :

$$E_1 = -\frac{\hbar^2}{2m} \iint_{V_1, V_2} \Psi^* (\vec{r}_1, \vec{r}_2) \Delta_1 \Psi (\vec{r}_1, \vec{r}_2) d\tau_1 d\tau_2$$

$$E_2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \iint_{V_1, V_2} \Psi^* (\vec{r}_1, \vec{r}_2) \Delta_2 \Psi (\vec{r}_1, \vec{r}_2) d\tau_1 d\tau_2$$

$$E_3 = -Zq^2 \iint_{V_1, V_2} \Psi^* (\vec{r}_1, \vec{r}_2) \frac{1}{r_1} \Psi (\vec{r}_1, \vec{r}_2) d\tau_1 d\tau_2$$

$$E_4 = -Zq^2 \iint_{V_1, V_2} \Psi^* (\vec{r}_1, \vec{r}_2) \frac{1}{r_2} \Psi (\vec{r}_1, \vec{r}_2) d\tau_1 d\tau_2$$

$$E_5 = q^2 \iint_{V_1, V_2} \Psi^* (\vec{r}_1, \vec{r}_2) \frac{1}{r} \Psi (\vec{r}_1, \vec{r}_2) d\tau_1 d\tau_2$$

3. L'énergie totale devient : $E = 2E_1 + 2E_2 + E_5 = -Z^2 \frac{mq^4}{\hbar^2} + \frac{5}{8} Z \frac{mq^4}{\hbar^2}$.

4. L'énergie se met sous la forme : $E = -\frac{mq^4}{\hbar^2} \left(Z^2 - \frac{5}{8} Z \right)$.

En première approximation : $E = -\frac{mq^4}{\hbar^2} \left(Z - \frac{5}{16} \right)^2$

L'erreur commise est donnée par : $\varepsilon = \left(\frac{5}{16} \right)^2 \approx 0.1$.

Chapitre III

Transitions radiatives

III.1. Introduction.

On sait que la conservation de l'énergie implique que le rayonnement susceptible de provoquer une transition radiative entre deux niveaux d'énergies E_1 et E_2 par absorption d'un photon doit satisfaire la relation $h\nu = E_2 - E_1$. Cependant comme on l'a évoqué à plusieurs reprises cette condition n'est pas suffisante pour qu'en pratique ce processus d'excitation se produise de manière significative: Les nombres quantiques caractérisant les états associés à chacun de ces niveaux doivent satisfaire aussi certaines "règles de sélection". L'une des plus importantes correspond à la conservation du moment cinétique du système "atome + rayonnement" et se traduit par la relation $\Delta J = 0, + 1, - 1$. Plus généralement, ces transitions radiatives sont caractérisées par les "coefficients d'Einstein" décrivant les taux de transition par émission spontanée $A_{2\rightarrow 1}$, émission stimulée $B_{2\rightarrow 1}$ et absorption $B_{1\rightarrow 2}$. Ces trois coefficients sont proportionnels entre eux et à la "force de la transition".

III.2. Probabilités de transition.

Abondons maintenant la déduction de la formule de Planck à base du principe de l'équilibre détaillé.

Considérons un système composé d'atomes et de rayonnement se trouvent en équilibre et soit N_1 le nombre d'atomes à l'état inférieur (énergie E_1) et N_2 le nombre d'atomes à l'état supérieur (énergie E_2). Les atomes émettent et absorbent le rayonnement électromagnétique en effectuant dans le premier cas des transitions $2\rightarrow 1$ (émission) et dans le second cas $1\rightarrow 2$ (absorption). En vertu du principe de l'équilibre détaillé (l'équilibre statistique) entre les processus d'émission et d'absorption s'établira quand le nombre de transitions $2\rightarrow 1$ en unité de temps sera égal au nombre de transitions $1\rightarrow 2$. Les transitions avec émission sont soit spontanées, soit stimulées.

La probabilité complète des deux processus est :

$$A_{21} + B_{21}\rho_V \quad \text{(III-2-1)}$$

Le nombre moyen de transitions en unité de temps est égal à :

$$dZ_{21} = (A_{21} + B_{21}\rho_V)N_2 \quad (\text{III-2-2})$$

La probabilité de transition avec absorption est $B_{12}\rho_V$ le nombre moyen de transition 1→2 en unité de temps est égal à :

$$dZ_{12} = B_{12}\rho_V N_1 \quad (\text{III-2-3})$$

Au cas d'équilibre :

$$dZ_{21} = dZ_{12} \quad (\text{III-2-4})$$

Donc :

$$(A_{21} + B_{21}\rho_V)N_2 = B_{12}\rho_V N_1 \quad (\text{III-2-5})$$

D'où :

$$\frac{N_2}{N_1} = \frac{B_{12}\rho_V}{(A_{21} + B_{21}\rho_V)} \quad (\text{III-2-6})$$

Mais comme l'équilibre est de nature statistique, le rapport N_2/N_1 est exprimé en moyen de la distribution de Boltzmann.

$$W_m = C' e^{-E_m/k_B T} \quad (\text{Des états à suite discrète d'énergies}) \quad (\text{III-2-7})$$

C'est une fonction qui est normée.

Dans le cas général, la fonction de Boltzmann s'écrit donc sous la forme :

$$W_m = C' g_m e^{-E_m/k_B T} \quad (\text{III-2-8})$$

g_m est le poids statistique, qui est égal à l'unité au cas des simples niveaux d'énergie (non dégénérés).

$$\frac{N_2}{N_1} = \frac{g_2 e^{-E_2/k_B T}}{g_1 e^{-E_1/k_B T}} \quad (\text{III-2-9})$$

Confrontant (6) et (9) :

$$\frac{B_{12}\rho_V}{(A_{21} + B_{21}\rho_V)} = \frac{g_2 e^{-E_2/k_B T}}{g_1 e^{-E_1/k_B T}} \quad (\text{III-2-10})$$

D'où :

$$\rho_V = \frac{g_2 A_{21}}{(B_{12} g_1 e^{(E_2 - E_1)/k_B T} - B_{21} g_2)} \quad (\text{III-2-11})$$

Mais d'après la condition des fréquences de Bohr, $E_2 - E_1 = h\nu$.

$$\rho_V = \frac{g_2 A_{21}}{(B_{12} g_1 e^{h\nu/k_B T} - B_{21} g_2)} \quad (\text{III-2-12})$$

III.3. Formes des raies spectrales.

Pour $T \rightarrow \infty$ c'est-à-dire pour $h\nu \ll k_B T$, le dénominateur de la relation (III-2-12) doit tendre vers zéro : ceci donne immédiatement :

$$B_{12} = \frac{g_2}{g_1} B_{21} \quad (\text{III-3-1})$$

A la même condition ($h\nu \ll k_B T$) doit se vérifier la formule de Rayleigh-Jeans.

$$\rho_V = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} k_B T \quad (\text{III-3-2})$$

Pour $\left(\frac{h\nu}{k_B T}\right) \ll 1$ on a eu en première approximation :

$$e^{h\nu/k_B T} = 1 + \frac{h\nu}{k_B T} \quad (\text{III-3-3})$$

Et

$$\rho_V = \frac{g_2 A_{21}}{g_1 B_{12}} \frac{1}{(e^{h\nu/k_B T} - 1)} \quad (\text{III-3-4})$$

Donc :

$$\rho_V = \frac{g_2 A_{21} k_B T}{g_1 B_{12} h\nu} \quad (\text{III-3-5})$$

Comparant avec la formule de Rayleigh-Jeans, on obtient :

$$\frac{g_2 A_{21}}{g_1 B_{12}} = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \quad (\text{III-3-6})$$

Et (III-3-16) devient :

$$\rho_V = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{(e^{h\nu/k_B T} - 1)} \quad (\text{III-3-7})$$

C'est justement la formule de Planck.

Posant $g_1 = g_2$, c'est-à-dire considérer les transitions entre les niveaux simples, les relations entre les coefficients d'Einstein s'écrivent dans ce cas sous la forme :

$$B_{12} = B_{21} ; A_{21} = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} B_{12} = \frac{8\pi h}{\lambda^3} B_{12} \quad (\text{III-3-8})$$

Dans la condition d'équilibre on ne tient compte parmi les transitions avec l'émission que les transitions se caractérisent par les coefficients A_{nm} , on obtient au lieu de la formule de Planck la formule de Wien. En effet, en supposant nul dans (III-2-12), le coefficient de transitions induites B_{21} et en tenant compte de (III-3-8) on obtient :

$$\rho_V = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} e^{-h\nu/k_B T} \quad (\text{III-3-9})$$

C'est justement la formule de Wien.

III.4. Quelques applications.

III.4.1. Calcul des coefficients d'Einstein :

Rappelons dans cette théorie sont examinés des atomes en équilibre thermodynamique avec la radiation dans une enceinte close. Si E_n et E_m sont deux niveaux d'énergie tels que $E_m > E_n$, il se produit dans les atomes des transitions $E_m \rightarrow E_n$ et $E_n \rightarrow E_m$.

La radiation dans une enceinte se caractérise par une densité volumique ρ_V qui représente la valeur moyenne de la densité de l'énergie d'un champ électromagnétique.

$$\rho_V = \frac{1}{8\pi} (\bar{E}_V^2 + \bar{H}_V^2) = \frac{1}{4\pi} \bar{E}_V^2 \quad (III-4-1)$$

Ensuite, par suite de l'isométrie complète de la relation dans l'enceinte :

$$\bar{E}_{Vx}^2 = \bar{E}_{Vy}^2 = \bar{E}_{Vz}^2 = \frac{1}{3} \bar{E}_V^2 \quad (III-4-2)$$

D'où :

$$\rho_V = \frac{3}{4\pi} \bar{E}_{Vx}^2 \quad (III-4-3)$$

Comme :

$$\bar{E}_{Vx}^2 = E_{0Vx}^2 \overline{\cos^2 2\pi \nu t} = \frac{1}{2} E_{0Vx}^2 \quad (III-4-4)$$

Alors :

$$\rho_V = \frac{3}{8\pi} \bar{E}_{0Vx}^2 \quad (III-4-5)$$

La probabilité de transition durant t secondes sous l'action de la radiation polarisée suivant l'axe x est :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |C_m|^2 dV = \frac{\bar{E}_{0Vx}^2 e^2 |X_{mn}|^2}{4\hbar^2} t \quad (III-4-6)$$

Déterminons de (III-4-5) \bar{E}_{0Vx}^2 en fonction de ρ_V :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |C_m|^2 dV = \frac{2\pi e^2}{3\hbar^2} |X_{mn}|^2 \rho_V t \quad (III-4-7)$$

Pour les probabilités de transition sous l'influence de deux autres composantes du champ, on obtient des expressions analogues :

$$\frac{2\pi e^2}{3\hbar^2} |Y_{mn}|^2 \rho_V t \quad \text{et} \quad \frac{2\pi e^2}{3\hbar^2} |Z_{mn}|^2 \rho_V t \quad (\text{III-4-8})$$

Donc, la probabilité de transition complète en unité du temps sous l'influence d'une radiation non polarisée est égale à :

$$\frac{2\pi e^2}{3\hbar^2} (|X_{mn}|^2 + |Y_{mn}|^2 + |Z_{mn}|^2) \rho_V \quad (\text{III-4-9})$$

Où en introduisant la notation :

$$|X_{mn}|^2 + |Y_{mn}|^2 + |Z_{mn}|^2 = |R_{mn}|^2 \quad (\text{III-4-10})$$

Il vient :

$$\frac{2\pi e^2}{3\hbar^2} |R_{mn}|^2 \rho_V = \frac{2\pi}{3\hbar^2} |eR_{mn}|^2 \rho_V \quad (\text{III-4-11})$$

Dans la théorie d'Einstein pour une même probabilité, on avait écrit :

$$B_{nm} \rho_V \quad (\text{III-4-12})$$

On obtient :

$$B_{nm} = \frac{2\pi}{3\hbar^2} |eR_{mn}|^2 \quad (\text{III-4-13})$$

Où, eR_{mn} est une expression quantique correspondant au moment dipolaire. Le B_{nm} caractérise la probabilité de transition en absorption, la probabilité de transition d'une émission spontanée est donc :

$$A_{mn} = \frac{16\pi^2 \hbar \nu^3}{c^3} B_{nm} \quad (\text{III-4-14})$$

Remplaçant B_{nm} , on aura :

$$A_{mn} = \frac{32\pi^3 \nu^3}{3\hbar c^3} |eR_{mn}|^2 \quad (\text{III-4-15})$$

Pour en déduire l'expression de l'énergie de radiation de fréquence ν étendue sur l'élément d'angle solide $d\Omega$, il faut multiplier l'équation (15) par $2\pi\hbar\nu \frac{d\Omega}{4\pi}$, on obtient :

$$I_{R,\Omega} d\Omega = \frac{16\pi^3 \nu^4}{3c^3} |eR_{mn}|^2 d\Omega \quad (\text{III-4-16})$$

Exercices**Exercice 01 :**

La probabilité $P(E)$ pour que l'énergie d'un system soit comprise entre E et $E+dE$ est donnée par la loi de Boltzmann.

$$P(E) = C e^{-E/kT}$$

Et l'énergie moyenne du système se calcule en écrivant:

$$\langle E \rangle = \frac{\int_0^{\infty} E P(E) dE}{\int_0^{\infty} P(E) dE}$$

Planck effectue ce calcul en découpant l'énergie en domaines d'épaisseur e , le calcul de la valeur moyenne s'effectue alors en remplissant les intégrales par les séries :

$$\langle E_n \rangle = \frac{\sum_0^{\infty} E_n P(E_n)}{\sum_0^{\infty} P(E_n)}$$

Où $E_n = ne$

1. Calculer $\langle E_n \rangle$ en fonction de e et de kT . On posant : $x = e^{-e/kT}$.
2. A l'équilibre thermodynamique, la densité d'énergie reçue par un électron élastiquement lié est donnée par :

$$u(T, \nu) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \langle E_n \rangle$$

En déduire la formule de Planck en précisant l'hypothèse faite sur le quantum d'énergie e .

Exercice 02 :

La densité d'énergie rayonnée par un corps noir est donnée par la loi de Planck:

$$u(T, \nu) = \frac{8\pi h \nu^2}{c^3} \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1}$$

1. Que devient cette loi dans le domaine de l'infrarouge ?
2. Que devient-elle dans le domaine visible ?
3. Montrer que l'on retrouve la loi de Stephan en intégrant sur toutes les fréquences.

Exercice 03 :

Des photons se propageant dans le vide se dirigent vers un miroir parfaitement réfléchissant. On appelle n leur densité et θ leur angle d'incidence par rapport à la normale au miroir.

1. En supposant que les photons forment un faisceau parallèle, calculer le nombre de chocs sur la surface dS pendant le temps dt (temps nécessaire pour parcourir la distance AB).
2. En déduire la quantité de mouvement totale communiquée au miroir pendant le temps dt .
3. Calculer la force résultante exercée par les photons sur le miroir.
4. Calculer la pression de radiation exercée par les photons sur le miroir.
5. Que devient la pression pour une surface parfaitement absorbante ?

Solutions**Solution 01 :**

1. Après le calcul de la valeur moyenne : $\langle E_n \rangle = \frac{\varepsilon}{e^{kT}-1}$.

2. On pose $\varepsilon = h\nu$, on trouve : $u(T, \nu) = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{h\nu/kT}-1}$.

Solution 02 :

1. L'infrarouge correspond à des longueurs d'onde grandes ($h\nu \ll kT$). Donc, $e^{h\nu/kT} = \frac{h\nu}{kT} + 1$. On aura : $u(T, \nu) = \frac{8\pi h\nu^2}{c^3} kT$. (Loi de Rayleigh-Jeans).

2. Dans le domaine visible : $h\nu \gg kT$, d'où $u(T, \nu) = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} e^{-h\nu/kT}$ (Loi de Wien).

3. L'intégration sur tous les fréquences donne : $u(T) = aT^4$ avec $a = \frac{8\pi^5 k^4}{15h^3 c^3}$.

Solution 03 :

1. Le volume balayé par les photons est : $d^2V = c \times dSdt \times \cos\theta$.

Le nombre de photons contenus dans ce volume est : $d^2N = nc \times dSdt \times \cos\theta$.

2. La quantité du mouvement totale s'écrit : $d^2p = d^2N \frac{h\nu \times \cos\theta}{c} = n(h\nu)dS(\cos\theta)^2$.

3. La force est donc : $dF = \frac{d}{dt}(dp) = 2 \frac{d^2p}{dt}$, soit encore : $dF = 2n(h\nu)dS(\cos\theta)^2$.

4. Par définition : $P = \frac{dF}{dS} = 2n(h\nu)(\cos\theta)^2$.

5. Pour une surface parfaitement absorbante, le photon n'est pas réfléchi : la variation de la quantité de mouvement au cours du choc est alors égale à celle des photons incidents ; la pression totale s'écrit : $n(h\nu)(\cos\theta)^2$.

Chapitre IV

Les rayons X

IV.1. Introduction.

Les rayons X sont des rayonnements électromagnétiques composés de photons de 5 picomètres à 10 nanomètres. Utilisé dans la cristallographie et l'imagerie médicale, il fut découvert en 1895 par le physicien Wilhelm Röntgen.

IV.2. Production et propriétés des rayons X.

IV.2.1. Production.

Les rayons X apparaissent sous l'action des électrons rapides. Dans les ampoules, en face d'une cathode se dispose une plaque métallique (les tubes en tungstène) dont le bombardement par des électrons aboutit à la production des rayons X. L'énergie des électrons d'excitation dans des appareils techniques usuels, est de l'ordre de 100 000 eV. Ces derniers temps des accélérateurs spéciaux d'électrons capables de produire des rayons X par freinage des électrons dont l'énergie est de 100 millions d'électrons-voltes.

Les rayons X invisibles pour l'œil sont susceptibles de produire une fluorescence visible et très intense de certaines substances cristallines naturelles (surface de zinc, etc....). Les rayons X impressionnent la plaque photographique et provoquent l'ionisation des gaz. Tous ces phénomènes servent à reconnaître et à étudier les rayons X.

IV.2.2. Propriétés.

IV.2.2-1-Absorption des rayons X :

Au nombre des propriétés remarquables des rayons X appartient l'aptitude singulière d'absorption qu'ils possèdent. Il apparaît tout d'abord que l'absorption des rayons X par une substance est complètement indépendante de ses propriétés optiques. Par exemple, le verre au plomb, incolore et transparent à la lumière, absorbe complètement les rayons X.

L'application des rayons X à des radioscopies médicales ou techniques est basée sur les lois d'absorption des rayons X dont on abordera maintenant l'étude. Si un pinceau parallèle de rayons X traverse une couche de substance, ce pinceau est atténué, c'est-à-dire que son intensité diminue. Cette atténuation est le résultat des deux processus :

1. Une diffusion.
2. Une absorption.

Ces deux processus sont essentiellement différents :

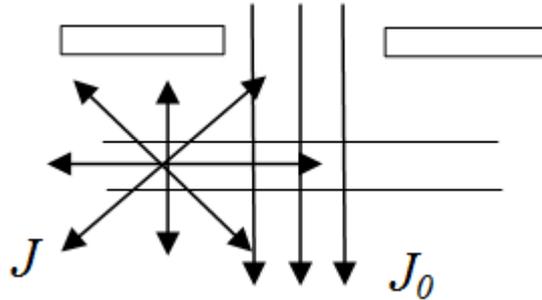


Fig. IV.1.1: Diffusion des rayons X traversant une substance

1. L'atténuation par diffusion s'explique par le fait qu'une partie des rayons est déviée et est ainsi séparée du pinceau parallèle. Ce phénomène est tout à fait analogue à la diffusion qu'éprouve la lumière traversant un milieu trouble. La diffusion ne consiste qu'en ce que la turbidité du milieu pour la lumière est due à la présence en état de suspension des particules suffisamment grandes dont l'indice de réfraction diffère de l'indice de réfraction du milieu. Pour les rayons X, par suite de leur faible longueur d'onde, tout milieu transparent à la lumière est un milieu trouble.
2. L'atténuation par absorption s'explique par le fait qu'une partie de l'énergie des rayons X éprouve une véritable absorption par la substance, c'est-à-dire en fin de compte se transforme en chaleur. Si un pinceau parallèle de rayons X est monochromatique, c'est-à-dire est composé de rayons d'une seule longueur d'onde, son atténuation par une couche de substance infiniment mince d'épaisseur dx obéit à la loi simple :

$$-dJ = \mu J dx \quad (\text{IV-2-1})$$

Où J est l'intensité du pinceau frappant la couche et μ est le coefficient caractérisant l'atténuation. En intégrant cette équation on obtient la loi d'atténuation des rayons X par une couche d'épaisseur finie d .

$$J = J_0 e^{-\mu d} \quad (\text{IV-2-2})$$

Où J_0 est l'intensité du pinceau parallèle pour $d = 0$, la dimension du coefficient d'absorption μ est en $[\text{cm}^{-1}]$.

Comme l'atténuation du pinceau se produit aux dépens de l'absorption proprement dite et de la diffusion, le coefficient d'atténuation μ est une somme de deux coefficients : le coefficient d'absorption varié τ et le coefficient de diffusion σ :

$$\mu = \tau + \sigma \quad (\text{IV-2-3})$$

Les deux coefficients τ et σ et par suite μ sont proportionnels à la masse de la substance. Alors, il est plus commode d'utiliser les coefficients dits massiques, c'est-à-dire les rapports μ/ρ , τ/ρ , et σ/ρ où ρ est la densité de la substance. Il est évident que la formule (IV-2-2) peut être mise sous la forme :

$$J = J_0 e^{-\frac{\mu}{\rho} \rho d} \quad (\text{IV-2-4})$$

Le produit ρd est la masse de la substance contenue dans une colonne de section 1 cm^2 et d'épaisseur d ; μ/ρ est la dimension $[\text{g}^{-1}\text{cm}^2]$.

Si $\rho d = 1$ alors $J = J_0 e^{-\frac{\mu}{\rho}}$; il s'ensuit que μ/ρ caractérise l'atténuation des rayons X par une couche contenant 1g de substance par centimètre carré.

Pour les calculs théoriques, il est encore plus commode d'utiliser des « coefficients dites atomiques » σ_a , τ_a , et μ_a , qu'on obtient des valeurs de μ/ρ , τ/ρ , et σ/ρ pour l'élément considéré en les multipliant par le rapport de l'atome gramme de l'élément A et le nombre d'Avogadro N_A .

$$\mu_a = \frac{\mu}{\rho} \frac{A}{N_A} ; \tau_a = \frac{\tau}{\rho} \frac{A}{N_A} ; \sigma_a = \frac{\sigma}{\rho} \frac{A}{N_A} \quad (\text{IV-2-5})$$

IV.2.2-2-Diffusion des rayons X :

La diffusion des rayons X obéit à des règles différentes de celles de la lumière dans le domaine optique du spectre. Dans le domaine des rayons X la longueur d'onde est du même ordre de la grandeur que les dimensions de l'atome. A savoir, la diffusion des rayons X est indépendante de la longueur d'onde. En étudiant la diffusion sous l'angle des oscillations forcées des électrons sous l'action du champ électromagnétique du rayonnement X incident,

J.J. Thomson, déjà au cours des premières recherches sur les rayons X, a déduit la formule suivante pour le coefficient de diffusion atomique :

$$\sigma_a = \frac{8\pi}{3} \frac{e^4}{m^2 c^4} Z \quad (\text{IV-2-6})$$

e : la charge de l'électron.

m : la masse de l'électron.

c : la vitesse de la lumière.

D'autre part, σ_a comme il a été déjà noté, a la dimension de l'aire. Ainsi donc, $\sigma_a/Z = \frac{8\pi}{3} \frac{e^4}{m^2 c^4}$ peut être assimilé à une section efficace de l'électron de diffusion du rayon X.

On obtient la section efficace de l'électron :

$$\sigma_a = \frac{8\pi}{3} \frac{e^4}{m^2 c^4} = 6.57 \times 10^{-25} \text{ cm}^2$$

Le rayon de cette section efficace est :

$$r_0 = 4.57 \times 10^{-13} \text{ cm}$$

Thomson se sert de la formule (6) pour déterminer le nombre d'électrons dans l'atome (égal à la charge du noyau Z) d'une façon très intéressante :

D'après la définition des coefficients atomiques :

$$\sigma_a = \frac{\sigma}{\rho} \frac{A}{N_A};$$

Pour le coefficient de diffusion massique, la formule (IV-2-6) donne :

$$\frac{\sigma}{\rho} = \frac{8\pi}{3} \frac{e^4}{m^2 c^4} \frac{N_A Z}{A} \quad (\text{IV-2-7})$$

En utilisant les résultats de σ_a , on a :

$$\frac{\sigma}{\rho} = 6.57 \times 10^{-25} \times 6.023 \times 10^{23} \frac{Z}{A} \approx 0.40 \frac{Z}{A} \quad (\text{IV-2-8})$$

La vérification expérimentale de la formule de Thomson a montré que pour des éléments elle se confirme de façon satisfaisante. La quantité σ/ρ obtenue expérimentalement ne dépend pas

en effet de la longueur d'onde et est égale à 0.20. en portant cette valeur dans (IV-2-8) on obtient :

$$0.20 = 0.40 \frac{Z}{A} \quad \text{où} \quad \frac{Z}{A} = \frac{1}{2} \quad (\text{IV-2-9})$$

C'est-à-dire que pour les éléments légers (excepté l'hydrogène) le numéro atomique doit être à la moitié du poids atomique. Cette relation est approximativement vérifiée pour les éléments du début du tableau périodique (He ($Z = 2$, $A = 4$), Li ($Z = 3$, $A = 6$), C ($Z = 6$, $A = 12$), etc.) les causes physiques de la relation (9) sont liées à la nature des forces nucléaires.

IV.3. Loi de Moseley.

IV.3.1. Définition.

La loi de Moseley est une loi empirique concernant les rayons X caractéristiques émis par les atomes. La loi avait été découverte et publiée par le physicien anglais Henry Moseley en 1913-1914. Jusqu'au travail de Moseley, le numéro atomique était simplement la place d'un élément dans le tableau périodique et n'était pas connu pour être associé à une quantité physique mesurable. En bref, la loi stipule que la racine carrée de la fréquence du rayon X émis est approximativement proportionnelle au numéro atomique $\sqrt{\nu} \propto Z$.

IV.3.2. Historique.

Le tableau périodique historique a été grossièrement ordonné en augmentant le poids atomique, mais dans quelques cas célèbres, les propriétés physiques de deux éléments suggéraient que le plus lourd devait précéder le plus léger. Un exemple est le cobalt ayant un poids de 58,9 et le nickel ayant un poids atomique de 58,7. Henry Moseley et d'autres physiciens ont utilisé la diffraction des rayons X pour étudier les éléments, et les résultats de leurs expériences ont conduit à organiser le tableau périodique par comptage de protons.

IV.3.3. Appareil.

Puisque les émissions spectrales pour les éléments les plus lourds seraient dans la gamme des rayons X mous (absorbés par l'air), l'appareil de spectrométrie a dû être enfermé dans un vide.

IV.3.4. Résultats.

Moseley a constaté que le K_{α} les lignes (en notation Siegbahn) étaient en effet liées au numéro atomique, Z .

Suivant l'exemple de Bohr, Moseley a découvert que pour les raies spectrales, cette relation pouvait être approximée par une formule simple, plus tard appelée loi de Moseley.

$$\nu = A(Z - b)^2 \quad (\text{IV-3-1})$$

Où:

ν est la fréquence de la raie d'émission des rayons X observée.

A et b sont des constantes qui dépendent du type de ligne (c'est-à-dire K, L, etc. en notation radiographique).

$$A = \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{2^2}\right) \times \text{frequence de Rydberg} \text{ et } b = 1 \text{ pour } K_{\alpha} \text{ lignes.}$$

$$A = \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{3^2}\right) \times \text{frequence de Rydberg} \text{ et } b = 7.4 \text{ pour } L_{\alpha} \text{ lignes.}$$

IV.3.5. Dérivation.

Moseley a dérivé sa formule empiriquement en ajustant les racines carrées des fréquences de rayons X tracées par le numéro atomique, et sa formule pourrait être expliquée en termes du modèle de Bohr de l'atome.

$$E = h\nu = E_i - E_f = \frac{m_e q_e^2 q_Z^2}{8h^2 \epsilon_0^2} \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) \quad (\text{IV-3-2})$$

Avec :

ϵ_0 est la permittivité de l'espace libre.

m_e est la masse d'un électron.

q_e est la charge d'un électron.

q_Z est la charge effective du noyau qui peut aussi s'écrire $q_e(Z - b)$.

n_f est le nombre quantique du niveau d'énergie final.

n_i est le nombre quantique du niveau d'énergie initial.

On suppose que le niveau d'énergie final est inférieur au niveau d'énergie initial.

Considérant la constante trouvée empiriquement qui réduisait approximativement (ou apparemment "criblait") l'énergie des charges, la formule de Bohr pour K_{α} les transitions aux rayons X sont devenues:

$$E = h\nu = E_i - E_f = \frac{m_e q_e^4}{8h^2 \epsilon_0^2} \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{2^2} \right) (Z - 1)^2 = \frac{3}{4} (Z - 1)^2 \times 13.6 \text{ eV} \quad (\text{IV-3-3})$$

Ou (en divisant les deux côtés par h pour convertir E en ν):

$$\nu = \frac{E}{h} = \frac{m_e q_e^4}{8h^3 \epsilon_0^2} \left(\frac{3}{4} \right) (Z - 1)^2 = (2.47 \times 10^{15} \text{ Hz}) (Z - 1)^2 \quad (\text{IV-3-4})$$

Le coefficient de cette formule se simplifie à une fréquence de $3/4$ *heures* Ry, avec une valeur approximative de $2,47 \times 10^{15}$ Hz.

IV.4. Effet Auger.

IV.4.1. Définition et principe.

L'effet Auger est un processus atomique découvert une première fois en 1922 par Lise Meitner mais dont la première étude complète a été faite par le physicien Pierre Auger en 1925.

Il consiste en l'émission par des atomes de ce qu'on appelle des électrons Auger. Initialement, un électron d'une couche profonde est éjecté d'un atome par effet photoélectrique sous l'action de rayons X. Un autre électron d'une couche supérieure descend pour occuper la place vacante et ce processus de désexcitation s'accompagne de l'émission d'un photon. Cette transition électronique produit alors soit purement et simplement un photon X, en l'occurrence lié à la fluorescence X soit l'émission d'un autre électron de l'atome ayant absorbé ce photon X. C'est précisément cet électron que l'on appelle un électron Auger. Ce phénomène est utilisé pour faire des analyses élémentaires de surface : c'est la spectrométrie Auger.

IV.4.2. Calcul des énergies.

En prenant par exemple le cas où un électron est éjecté de la couche électronique K d'énergie E_K , un autre électron présent sur la couche L , d'énergie E_L peut descendre sur la couche K en transmettant son énergie à un troisième électron sur la couche M , d'énergie E_M , qui va quitter l'atome (c'est l'électron Auger). L'énergie E de l'électron Auger se calcule par :

$$E = \frac{1}{2}mv^2 = (E_L - E_K) - (0 - E_M) = E_L + E_M - E_K \quad (\text{IV-4-1})$$

Ces calculs approximatifs doivent être affinés en pratique en tenant compte de nombreuses autres considérations, comme les niveaux hyperfins, en particulier dans les applications quantitatives de la spectrométrie Auger.

IV.4.3. Spectrométrie Auger.

Un spectromètre Auger est un appareil très semblable à un microscope électronique à balayage ; il permet d'ailleurs de faire des images du même type.

L'appareil comporte un canon électronique qui bombarde l'échantillon, et un détecteur d'électrons qui détecte les électrons Auger et détermine leur énergie. L'énergie des électrons

permet de déterminer la nature chimique des atomes, et le mode balayage permet de dresser une cartographie chimique de la surface de l'échantillon.

Les électrons Auger ayant une faible énergie, seuls ceux provenant des premières couches atomiques sortent de l'échantillon, c'est donc une méthode d'analyse superficielle. Pour la même raison, il faut travailler en vide poussé (ultra-vide, de l'ordre de 10^{-8} Pa, 10^{-10} Torr).

Par ailleurs, ce sont les éléments légers (faible numéro atomique, Z) qui produisent le plus d'électrons Auger, les atomes lourds (Z élevé) produisant surtout des photons X. L'analyse chimique est donc limitée aux éléments légers.

Exercices

Exercice 01 :

La section efficace totale de l'interaction d'un rayonnement X d'énergie de 100 KeV avec un atome d'hydrogène est ; $\sigma(\text{H}) = 49,0$ barn, celle avec un atome d'oxygène est 4,1 barn et celle avec un atome d'azote 3,56 barn.

1. Calculer la section efficace de la molécule d'eau et celle de l'air (78% azote et 22% oxygène).
2. On définit le coefficient d'atténuation d'un milieu matériel par $\mu = \sigma \cdot N$ et le coefficient d'atténuation massique par ; $\mu_m = \sigma N / \rho$, où N est la densité atomique ou moléculaire et ρ la masse volumique.

Calculer l'atténuation massique de l'eau et celle de l'air. La densité de l'air est $\rho = 1.2250 \text{ kg/m}^3$ et sa masse molaire 28.964 g/mole.

Exercice 02 :

Le tube Crookes permet d'observer l'émission de rayon X provenant de différents matériaux en changeant l'anticathode. Les mesures ont permis à Moseley d'écrire la loi des fréquences : $\nu = K^2(Z - \sigma_n)^2$ où Z est le nombre de charge du noyau et σ_n la constante d'écran.

1. En écrivant qu'un rayon X est émis lors d'une transition entre un niveau très excité ($n \gg 1$) et un niveau très lié au noyau, retrouver la loi de Moseley. Déterminer la constante K .
2. Donner l'expression de la longueur d'onde X émise en fonction de la constante de Rydberg, du nombre quantique n et de la charge apparente du noyau.
3. On observe les rayons X émis par une anticathode de cuivre. déterminer les longueurs d'onde correspondant aux séries K, L, M. On donne :

$$R = 1.097 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$$

$$Z = 29$$

$$n = 1 \rightarrow \sigma_1 \approx 1.5$$

$$n = 2 \rightarrow \sigma_2 \approx 10$$

$$n = 3 \rightarrow \sigma_3 \approx 20$$

Solutions

Solution 01 :

1. Sections efficaces : molécule d'eau ($\sigma_{eau} = 5.08$ barn), et de l'air ($\sigma_{air} = 3.68$ barn).

$$2. \text{l'eau : } N = \frac{1}{18} 6.02 \times 10^{23} = 3.3 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$$

$$\text{et } \mu_m = \frac{5.08 \times 10^{-24} \times 3.3 \times 10^{22}}{1} = 0.17 \text{ cm}^2 \text{ g}^{-1}.$$

$$\text{l'air : } N = \frac{1.23 \times 10^{-3} \times 3.3 \times 10^{22}}{28.964} = 2.56 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$$

$$\text{et } \mu_m = \frac{3.68 \times 10^{-24} \times 2.56 \times 10^{19}}{1.23 \times 10^{-3}} = 0.077 \text{ cm}^2 \text{ g}^{-1}.$$

Solution 02 :

$$1. \text{L'énergie totale devient : } E_n = -\frac{1}{n^2} \frac{(Z - \sigma_n)^2 \mu q^4}{2\hbar^2}$$

La fréquence des rayons X émis a la forme suivante $\nu = \frac{1}{n^2} \frac{(Z - \sigma_n)^2 \mu q^4}{4\pi\hbar^3} = \frac{Rc}{\left(1 + \frac{m}{M}\right) n^2} (Z -$

$$\sigma_n)^2 \text{ avec } R = \frac{mq^4}{4\pi\hbar^3 c}.$$

Pour la série K ($n = 1$), en comparant ce résultat à la loi de Moseley, on pose $K^2 = \frac{Rc}{\left(1 + \frac{m}{M}\right)}$.

$$2. \text{La longueur d'onde s'écrit : } \frac{1}{\lambda} = \frac{R}{\left(1 + \frac{m}{M}\right) n^2} (Z - \sigma_n)^2.$$

3. Pour l'atome du cuivre $Z = 29$, la masse de son noyau est importante, en première approximation, on pose $m/M \ll 1$. on aura :

$$\lambda = \frac{1}{R} \left(\frac{n}{Z - \sigma_n} \right)^2$$

On aura la formule suivante $\lambda = 911.6 \left(\frac{n}{Z - \sigma_n} \right)^2$ lorsque λ est exprimée en angström.

n	Couche	λ (Å)
1	K	1.21
2	L	10.10
3	M	101.29

Références

- I. E. Chpolski, Physique Atomique, tome I, Moscou, Edition Mir, 1978.
- II. E. Chpolski, Physique Atomique, tome II, Moscou, Edition Mir, 1978.
- III. B. Held, Physique Atomique, Paris, Masson, 1991.