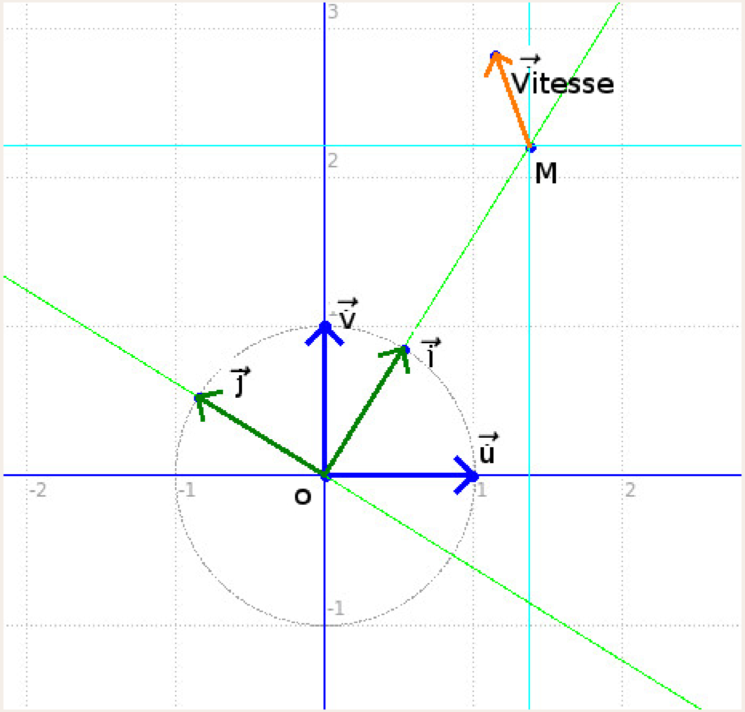
Calcul de l'atome d'hydrogène

Rien de moins. Mais en passant par le calcul de l'orbite géostationnaire et par la seconde Loi de Kepler pour nous faire la main.

RAPPEL DE CINEMATIQUE

1 Vitesse et accélération d'un point matériel dans un plan

Soit M un point matériel se déplaçant dans un plan de repère orthonormé $O\,\vec{u}\,\vec{v}$



Associons au point M le vecteur $\overrightarrow{OM}$ de module r et d'argument θ

$$r = |\overrightarrow{OM}| \quad \text{(longueur)}$$

$$\theta = \text{angle entre } \overrightarrow{OM} \text{ et } \vec{u} \text{ (en radian)}$$

$$\dot{\theta} = \frac{d}{dt}\theta = \omega \qquad \text{(en radian / seconde)}$$

$$\overrightarrow{OM} = r\left[(\cos\theta)\,\vec{u} + (\sin\theta)\,\vec{v}\right]$$

$\overrightarrow{OM}$ est appelé le « rayon vecteur »

Associons au point M le **repère cartésien orthonormé tournant** $M\vec{i}\,\vec{j}$ tel que $\vec{i}$ soit à tout instant colinéaire avec le rayon vecteur (radial) et $\vec{j}$perpendiculaire au rayon vecteur (ortho-radial) (certains disent coordonnées polaires, mais ces dernières définissent la position avec un angle et une distance).

Remarque : On notera les dérivées avec un point au dessus de la lettre : $\dot{r} = \frac{dr}{dt}$

1 Relations entre les deux systèmes de coordonnées :

$$\begin{aligned} \vec{i} &= (\cos\theta)\vec{u} + (\sin\theta)\vec{v} \\ \vec{j} &= -(\sin\theta)\vec{u} + (\cos\theta)\vec{v} \end{aligned}$$

1.1 Nous en déduisons que :

$$\frac{d}{dt}\vec{i} = \dot{\theta}\,\vec{j}$$

démonstration :

$$\begin{aligned}\frac{d\,\vec{i}}{dt} &= -\dot{\theta}(\sin\theta)\vec{u} + \dot{\theta}(\cos\theta)\vec{v} \\ &= \dot{\theta}[-(\sin\theta)\vec{u} + (\cos\theta)\vec{v}\,] \\ &= \dot{\theta}\,\vec{j}\end{aligned}$$

1.2 Ainsi que:

$$\frac{d}{dt}\vec{j} = -\dot{\theta}\,\vec{i}$$

démonstration :

$$\begin{aligned}\frac{d\,\vec{j}}{dt} &= -\dot{\theta}(\cos\theta)\vec{u} - \dot{\theta}(\sin\theta)\vec{v} \\ &= \dot{\theta}[-(\cos\theta)\vec{u} + (\sin\theta)\vec{v}\,] \\ &= -\dot{\theta}\,\vec{i}\end{aligned}$$

2 Calcul du vecteur vitesse

$$\begin{aligned}\frac{d\,\overrightarrow{\mathrm{OM}}}{dt} &= \frac{d}{dt}(r\,[(\cos\theta)\,\vec{u} + (\sin\theta)\,\vec{v}]) \\ &= \dot{r}(\cos\theta)]\,\vec{u} - r\dot{\theta}\,(\sin\theta)\,\vec{u} + r(\cos\theta)\frac{d\,\vec{u}}{dt} + \dot{r}(\sin\theta)\vec{v} + r\,\dot{\theta}\,(\cos\theta)\vec{v} + r\,(\sin\theta)\frac{d\,\vec{v}}{dt}\end{aligned}$$

$$= \dot{r}(\cos\theta)\,\vec{u} - r\dot{\theta}\,(\sin\theta)\,\vec{u} + \dot{r}(\sin\theta)\vec{v} + r\,\dot{\theta}\,(\cos\theta)\vec{v}$$

$$= \dot{r}[(\cos\theta)\,\vec{u} + (\sin\theta)\vec{v}] + r\,\dot{\theta}[-(\sin\theta)\,\vec{u} + (\cos\theta)\vec{v}]$$

$$= \dot{r}\,\vec{i} + r\,\dot{\theta}\,\vec{j}$$

2.1 Calcul du vecteur vitesse directement en coordonnées radiale et orthoradiale :

$$\overrightarrow{OM} = r\,\vec{i}$$

$$\vec{V} = \frac{d\,\overrightarrow{OM}}{dt}$$

$$= \dot{r}\,\vec{i} + r\frac{d\,\vec{i}}{dt}$$

$$= \dot{r}\,\vec{i} + r\,\dot{\theta}\,\vec{j}$$

3 Calcul de l'accélération

$$\vec{\Gamma} = \frac{d}{dt}\vec{V}$$

$$
\begin{aligned}
&= \frac{d}{dt}(\dot r\,\vec i + r\,\dot\theta\,\vec j) \\
&= \ddot r\,\vec i + \dot r\frac{d}{dt}\vec i + \dot r\,\dot\theta\,\vec j + r\,\ddot\theta\vec j + r\,\dot\theta\frac{d}{dt}\vec j \\
&= \ddot r\,\vec i + \dot r\,\dot\theta\,\vec j + \dot r\,\dot\theta\,\vec j + r\,\ddot\theta\vec j - r\,\dot\theta^2\,\vec i \\
&= (\ddot r - r\,\dot\theta^2)\vec i + (r\,\ddot\theta + 2\,\dot r\,\dot\theta)\,\vec j \\
&= (\ddot r - r\omega^2)\vec i + (r\,\dot\omega + 2\,\dot r\omega)\,\vec j
\end{aligned}
$$

Cas où $\boldsymbol{r = C^{\mathrm{te}}}$ et $\boldsymbol{\omega = \mathrm{C}^{\mathrm{te}}}$

Dans le cas où le rayon vecteur est de longueur constante (le point matériel suit une trajectoire circulaire) et la vitesse de rotation est constante, nous avons :

$$
\begin{array}{ll}
r = C^{\mathrm{te}} & \omega = \mathrm{C}^{\mathrm{te}} \\
\dot r = 0 & \dot\omega = 0 \\
\ddot r = 0 &
\end{array}
$$

ce qui donne $\boxed{\vec\Gamma = -r\,\dot\theta^2\,\vec i = -r\omega^2\,\vec i}$

L'accélération est alors radiale (la composante tangentielle suivant $\vec{j}$ est nulle) et son module est de valeur bien connue $\omega^2\,r$ le signe (-) indiquant qu'elle est dirigée en sens contraire de $\vec{i}$, c'est à dire vers l'intérieur de la trajectoire (vers le centre du cercle), elle est dite centripète.

C'est à peu de chose près ce qui se passe pour les satellites géostationnaires.

4 APPLICATIONS :

Calcul de l'altitude de l'orbite géostationnaire

Un satellite géostationnaire de masse m_1 décrivant une orbite circulaire de rayon r est attiré par la Terre de masse m_2 avec une force $\vec{P}$ (son poids)

$$\vec{P} \;=\; G\,\frac{m_1\,m_2}{r^2}$$

r n'étant pas la hauteur du satellite au dessus du sol (l'altitude) mais sa distance par rapport au centre de la Terre.

G est la constante de gravitation universelle

Cette force dirigée vers le centre incurve sa trajectoire, qui sans cela serait une ligne droite. Si bien que son mouvement est accéléré suivant le vecteur Γ dont on vient de calculer l'expression.

La loi fondamentale de la dynamique $(\vec{F} = m\vec{\gamma})$ nous donne:

$$\vec{P} = m_1 \vec{\Gamma}$$

De ces deux équations nous déduisons:

$$m_1 \Gamma = G \frac{m_1 m_2}{r^2}$$

$$\Gamma = G \frac{m_2}{r^2}$$

Nous voyons déjà que la masse m_1 du satellite n'intervient pas dans le calcul

$$\omega^2 r = G \frac{m_2}{r^2}$$

$$\omega^2 r^3 = G m_2$$

$$r = \sqrt[3]{G\frac{m_2}{\omega^2}}$$

Remarque: ω est connu puisque le satellite restant toujours à la verticale d'un même point de l'équateur fait un tour par 23h56'. (24h00 par rapport au Soleil, mais 23h56 par rapport aux étoiles dites « fixes » durée du jour sidéral soit 86164s)

$\omega = 2\pi f = 2\pi(86164s)^{-1}$ de dimension T^{-1}

$G = 6,67428 \times 10^{-11}\, m^3\, \mathrm{kg}^{-1}\, s^{-2}$ de dimension $L^3\, M^{-1}\, T^{-2}$

$m_2 = 5,9736 \times 10^{24}$ kg de dimension M

Vérifions l'homogénéïté de la formule avant de nous lancer dans le calcul numérique:

$$\left[\!\left[\sqrt[3]{G\frac{m_2}{\omega^2}}\right]\!\right] = \sqrt[3]{L^3\, M^{-1}\, T^{-2}\frac{M}{T^{-2}}}$$

$$= \sqrt[3]{L^3} = L$$

et $[\![r]\!] = L$ (également), la formule est homogène du point de vue de équations aux dimensions. On peut donc utiliser la calculatrice:

$$
\begin{aligned}
r &= \sqrt[3]{\frac{6,67428 \times 10^{-11} \times 5,9736 \times 10^{24} \times (86164)^2}{4\pi^2}} \\
&= 42,167 \times 10^6\, m
\end{aligned}
$$

Soit $42\,167$ km du centre de la Terre.

Soustrayons les 6378 km du rayon équatorial pour obtenir l'altitude:

$42167 - 6378 = 35789\,\mathrm{km}$

Je lis ici et là 35784 km... je vous laisse trouver où se cachent les 5000 m d'écart...

Démonstration de la seconde loi de Kepler

"Le rayon vecteur qui lie une planète au soleil balaie des aires égales en des temps égaux".

Kepler l'a constaté en analysant les données astronomiques recueillies grace à l'observation par Tycho Brahe et en a déduit que le soleil exerce une force d'attraction centrale sur la planète. (La relativité générale à modifié l'interprétation de ce dernier point...)

En voici la démonstration inverse à partir des lois de la dynamique :

Considérons le cas d'un objet de masse m, une planète, une comête ou un astéroïde par exemple, passant dans le champ d'attraction d'un objet de masse M beaucoup plus importante que m, une étoile par exemple. Considérons M comme immobile et plaçons-la en O de notre graphique, liée au repère cartésien orthonormé $O\,\vec{u}\,\vec{v}$.

La masse m, quelle que soit sa vitesse au départ et la direction de sa trajectoire est soumise à une force unique due à l'attraction gravitationnelle que M exerce sur elle. Les lois de la physiques démontrables en laboratoire à notre échelle nous indiquent que cette force est appliquée sur m et est dirigée dans la direction de M. On dit qu'elle est « centrale ».

Elle a pour valeur :

$$|\vec{F}| \;=\; G\,\frac{m\,M}{r^2}$$

r étant la distance séparant les deux masses et G la constante de la Gravitation Universelle.

Si nous représentons cette force dans le repère $M\,\vec{i}\,\vec{j}$, nous voyons que le fait que la force soit centrale implique que la composante suivant $\vec{j}$ est nulle.

On peut donc écrire :

$$\begin{aligned}\vec{F} \;&=\; G\,\frac{m\,M}{r^2}\,\vec{i}+0\times\vec{j}\\[1em] &=\; G\,\frac{m\,M}{r^2}\,\vec{i}\end{aligned}$$

Cette force exercée sur la masse m provoque son accélération

$$\vec{\Gamma} \;=\; \frac{\vec{F}}{m}$$

m étant un scalaire, les vecteurs $\vec{\Gamma}$ et $\vec{F}$ sont colinéaires, $\vec{\Gamma}$ a tout comme $\vec{F}$ sa composante suivat $\vec{j}$ nulle.

$$\vec{\Gamma} \;=\; \frac{1}{m}\,G\,\frac{m\,M}{r^2}\,\vec{i}$$

$$=\; G\,\frac{M}{r^2}\,\vec{i}$$

Notons au passage que Γ dépend de M et de r mais pas de m. C'est ce qu'on nomme « l'accélération de la pesanteur ».

Nous avons d'autre part calculé plus haut la valeur de $\vec{\Gamma}$ pour un point matériel en déplacement :

$$\vec{\Gamma} \;=\; (\ddot{r} - r\omega^2)\vec{i} + (r\,\dot{\omega} + 2\,\dot{r}\omega)\,\vec{j}$$

En égalant ces deux expressions nous obtenons :

$$(\ddot{r} - r\,\dot{\theta}^2)\vec{i} + (r\,\ddot{\theta} + 2\,\dot{r}\,\dot{\theta})\,\vec{j} \;=\; G\,\frac{M}{r^2}\,\vec{i} + 0 \times \vec{j}$$

Il en résulte deux égalités distinctes, l'une concernant la composante $\vec{i}$ et l'autre la composante $\vec{j}$

$$\begin{aligned} \ddot{r} - r\,\dot{\theta}^2 &= G\,\frac{M}{r^2} \\ r\,\ddot{\theta} + 2\,\dot{r}\,\dot{\theta} &= 0 \end{aligned}$$

La première égalité nous a servi à calculer la taille de l'orbite d'un satellite en fonction de la masse centrale et de la période de révolution.

C'est maintenant à la deuxième égalité que nous allons nous intéresser :

$$\begin{aligned} r\,\ddot{\theta} + 2\,\dot{r}\,\dot{\theta} &= 0 \\ r\dot{\omega} + 2\dot{r}\omega &= 0 \end{aligned}$$

C'est une équation différentille à variables séparables :

$$r\dot{\omega} = -2\dot{r}\omega$$

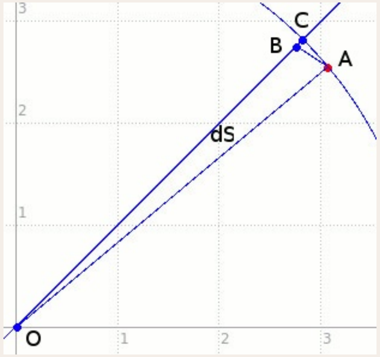
$$r\,\frac{d\omega}{dt} = -2\,\frac{dr}{dt}\,\omega$$

$$\begin{aligned} r\,d\omega &= -2\,dr\,\omega \\ \frac{1}{\omega}\,d\omega &= -2\,\frac{1}{r}\,dr \\ \int \frac{1}{\omega}\,d\omega &= -2\int \frac{1}{r}\,dr \\ \ln(\omega) &= -2\ln(r) + \ln(K) \\ \omega &= \mathrm{e}^{-2\ln(r)+\ln(K)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \omega &= \mathrm{e}^{-2\ln(r)+\ln(K)} \\ &= \frac{1}{\mathrm{e}^{-2\ln(r)}} \times C \\ &= \frac{C}{r^2} \end{aligned}$$

Donc ω est inversement proportionnel à r , voyons la conséquence que cela implique.

Calculons l'aire balayée par le rayon vecteur lorsque l'objet se déplace entre les points A et B de sa trajectoire:



Si on considère un déplacement très petit, la longueur de la protion de trajectoire AB peut être confondue avec la longueur de l'arc AC centré sur le point d'attraction O.

Cette longueur a pour valeur :

$$\begin{aligned} \mathrm{AB} &= \mathrm{AC} \\ &= r\,d\theta \end{aligned}$$

Les points B et C peuvent êtres confondus, la surface dS balayée vaut donc :

$$\begin{aligned} dS &= \frac{1}{2}\mathrm{OA}\times\mathrm{AC} \\ &= \frac{1}{2}r \times r\,d\theta \end{aligned}$$

$$= \frac{1}{2} r^2 \, d\theta$$

$$\frac{dS}{dt} = \frac{1}{2} r^2 \frac{d\theta}{dt}$$

$$= \frac{1}{2} r^2 \omega$$

Et puisque nous avons trouvé que $\omega = \frac{C}{r^2}$,   il vient :

$$\frac{dS}{dt} = \frac{1}{2} r^2 \frac{C}{r^2}$$

$$= \frac{C}{2} = C' = C^{\text{te}}$$

Intégrons pour trouver l'expression de l'aire en fonction du temps :

$$dS = C' \, dt$$

$$\int dS = \int C' \, dt$$

$$S = C' t + k$$

La surface balayée par le rayon vecteur est donc proportionnelle au temps.

Nous obtenons la seconde Loi de Kepler qui dit que les surfaces balayées en des temps égaux sont égales.

Nous sommes partis de la simple hypothèse que la force est centrale pour arriver à cette conclusion. On pourrait donc penser que c'est un effet de la force d'attraction. Mais que se passerait-il si en O il n'y avait pas de masse attractive? On considère par exemple un astéroïde qui passe par là, à des millions de km, mais on « supprime le Terre » et, à la place, on dispose juste un petit télescope... et bien la composante $r\,\ddot{\theta} + 2\,\dot{r}\,\dot{\theta}$ qui était nulle serait tout aussi nulle, et le calcul serait exactement le même, la surface balayée par le rayon vecteur serait proportionnelle au temps bien que l'astéroïde filerait tout droit. (Enfin, sur une géodésique de l'espace-temps me dit Albert). Et il en serait de même de n'importe quel corps se déplaçant en ligne droite observé de n'importe que point de l'espace.

Donc la seconde Loi de Kepler est une conséquence de **l'absence d'effet** sur l'axe orthoradial d'une masse.

Calcul de l'atome d'hydrogène

Nous allons calculer les niveaux énergétiques des orbites électroniques de l'atome d'hydrogène.

Nous allons faire le calcul sans utiliser l'équation de Schrödinger. Le calcul que nous allons faire tiendra toutefois compte de la « dualité onde-particule » (thèse de Louis de Broglie en 1924, qui lui valu le prix nobel en 1929) qui associe à l'électron une onde de fréquence ν fonction de son énergie $E=h\nu$ (h est la constante de Planck $6,626068\times10^{-34}\,m^2\,\mathrm{kg}\ s^{-1}$) tout en considérant encore l'électron comme une particule ponctuelle soumise à une force centrale et en lui appliquant les lois de la dynamique classique.

C'est donc une approche intermédiaire entre l'électrodynamique classique et la mécanique quantique.

C'est l'approche de Bohr qui eu l'intuition que l'onde associée à l'électron sur son orbite doit être stationnaire, c'est à dire que la longueur de l'orbite doit être un multiple entier de sa longueur d'onde $\lambda=\frac{v}{\nu}$, v étant la vitesse de l'électron. Cette hypothèse restreint les orbites possibles à certaines orbites stables, l'atome forme ainsi un sytème quantifié. Les résutats du calculs sont conformes à l'expérience.

C'est un système résonnant qui peut être calculé directement dans le cas de l'atome d'hydrogène qui ne comporte qu'un seul électron. Nous ne tiendrons compte que du nombre quantique principal n mais pas des nombres quantiques secondaires l et m. Pour aller plus loin en tenant compte de ces paramètres supplémentaires, voir l'article *l'Atome d'Hydrogène* sur Wikipédia et bien sûr Physique Quantique.

Hypothèses de base :

La description qui suit est celle d'un modèle (en l'occurrence le Modèle de Bohr). Ce modèle est une représentation mentale de ce que *semble* être la réalité telle que nous la mesurons grossièrement avec nos instruments. Ce n'est pas LA réalité. Ce modèle permet de calculer avec une certaine précision les raies spectrales de l'atome d'hydrogène, mais ne va guère au delà. En particulier il échoue dans le cas d'atomes plus complexes. La mécanique quantique qui a ensuite été développée permet d'aller beaucoup plus loin, alors même qu'elle est bien moins intuitive, ne permettant plus de se représenter une images simple de “la réalité", allant dans certaines de ses interprétations jusqu'à douter qu'il existe une réalité bien définie avant que nous la mesurions ("réduction du paquet d'ondes").

Il semblerait en effet que la nature à cette échelle ne se laisse pas si facilement dessiner, mettre en images fussent-elles mentales... Par exemple la représentation des particules accompagnée d'une “onde pilote” censée expliquer la “dualité onde-particule” (ou onde-corpuscule) suppose qu'il existerait bien une particule ponctuelle ayant une position et une vitesse bien définie simultanément accompagnée par une onde. Et bien c'est une façon de se raccrocher à des préjugés qui ne correspondent pas à ce que nous mesurons (remarque : ce que nous mesurons ne correspond pas non plus toujours à la réalité, lire les ouvrages d'Etienne Klein à ce sujet) ni à ce que nous disent les équations de la mécanique quantique. On aurait pu s'en douter lorsqu'on affirmait qu'une particule "élémentaire" possède une extension spatiale (taille) et un spin et qu'on suggère que le spin correspond à la rotation de cette entité de taille nulle. Il fallait oser ! Et comment un objet de taille nulle (ce qui devrait permettre de le situer dans l'espace avec une précision infinie) se révèle avoir des propriétés ondulatoires (qui correspondent à un flou total quant à la position) ? Et les relations d'incertitudes de la mécanique quantique nous interdisent de connaitre simultanémant la vitesse et la position de cette particule ponctuelle. Tout cela incite à penser que cette représentation d'une particule accompagnée de son onde pilote est un concept très... flou ! Et bien « pire »: le test des inégalités de Bell par les expériences d'Alain Aspect (« paradoxe EPR ») confortent la mécanique quantique dans ce qu'elle a de plus mystérieux : la non localité et l'intrication quantique. L'abandon du concept de particule ponctuelle me semble inévitable. La position ne se concrétise que lors de la mesure, lors d'une interaction avec une autre entité donc. Et avant la mesure il y avait quoi ? une onde ? oui sans doute. (remarque : l'expression "sans doute indique justement qu'il y a un doute !") Un "champ quantique" ? Oui, ça c'est pas mal ! Plusieurs champs quantiques de natures différentes ? Oui c'est encore mieux, afin de rendre compte de la pluralité des interactions connues. Et c'est quoi un champs quantique ? Ben c'est un truc qui se comporte comme un paquet d'onde qui peut se réduire en prenant l'aspect (vu par nos instruments) d'une particule... Faudrait quand même pas s'attendre à ce que les électrons soit faits de bois, les protons de silex et les neutrons de pâte à modeler ! Voire des micro-planètes avec des plantes et des animaux dessus !

Sur la page d'entrée de ce site vous trouverez des **articles** avec liens vers des vidéos de conférences portant sur la mécanique quantique et les expériences d'Alain Aspect, ainsi que des conférences d'Etienne Klein. A voir absolument.

Toutes ces précisions pour dire que la mécanique quantique est une théorie merveilleusement passionnante, je vous en parlerai un jour d'une manière plus mathématique. En attendant ces petits calculs sur le modèle de l'atome de Bohr permettent une approche approximative qui fonctionne... pas trop mal.

Voici donc les hypothèses simplissimes que nous retenons pour faire ces calculs :

L'atome d'hydrogène neutre est constitué d'un noyau (possédant un seul proton) autour duquel gravite un électron unique.

L'électron tourne autour du noyau de l'atome sur une orbite de rayon r. Pour l'orbite fondamentale, nous supposons le rayon de longueur constante (l'électron est considéré comme suivant une trajectoire circulaire) et la vitesse de rotation est supposée constante;

Nous avons :

$$\begin{array}{ll} r = C^{\text{te}} & \omega = \mathsf{C}^{\text{te}} \\ \dot{r} = 0 & \dot{\omega} = 0 \\ \ddot{r} = 0 & \end{array}$$

Nous supposons à priori que la vitesse de l'électron n'est pas relativiste.

L'accélération ayant pour expression :

$$\vec{\Gamma} = (\ddot{r} - r\omega^2)\vec{i} + (r\,\dot{\omega} + 2\,\dot{r}\omega)\,\vec{j}$$

Elle se simplifie, compte tenu de l'hypothèse de départ pour devenir :

$\vec{\Gamma} = -r\,\dot{\theta}^2\,\vec{i} = -r\omega^2\,\vec{i}$

Cette accélération est donc radiale centrée sur la noyau (la composante tangentielle suivant $\vec{j}$ est nulle) et son module est de valeur $\omega^2 r$ le signe (-) indiquant qu'elle est dirigée en sens contraire de $\vec{i}$, c'est à dire vers l'intérieur de la trajectoire (vers le centre du cercle), elle est dite centripète.

En valeur absolue cela donne :

$$\gamma \;=\; \omega^2\,r \tag{1}$$

La vitesse de l'électron sur son orbite est :

$$\begin{aligned} v &= \frac{2\pi r}{T} = 2\pi\nu r \\ &= \omega r \end{aligned}$$

soit

$$\omega \;=\; \frac{v}{r} \tag{2}$$

Remarque : En électronique la fréquence est désignée par la lettre f, en physique on emploie la lettre greque ν (nu).

L'électron de charge électrique négative (q^-) subit la force électrostatique (loi de Coulomb) attractive de la part du noyau chargé positivement (q^+), et que nous considèrerons comme immobile étant donné qu'il est 1800 fois plus massif que l'électron.

$$\vec{F_1} \;=\; \frac{q^- q^+}{4\pi\varepsilon_0 r^2}\,\vec{i}$$

$$F_1 = \left|\vec{F_1}\right| \;=\; \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \times \frac{e^2}{r^2} \tag{3}$$

e étant la charge de l'électron, $e = 1,6021 \times 10^{-19} C$

$k = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}$, ε_0 est la permittivité électrique du vide. $\varepsilon_0 = 8,85374 \times 10^{-12}$ (SI)

A cette échelle, la force d'attraction gravitationnelle, quant à elle, est négligeable devant cette force électrostatique.

L'énergie potentielle de l'électron soumis à cette force et à la distance r du noyau est :

$$E_p \;=\; -F_1 \times r$$

Remarque: Energie négative :

Le signe (-) parce qu'il faut fournir de l'énergie à l'électron pour l'éloigner du noyau (et que l'énergie est nulle à l'infini, si on fournit l'énergie d'ionisation). Donc lorsque l'électron se trouve plus près du proton dans le champ coulombien, son énergie est inférieure à celle qu'il a lorsqu'il en est plus éloigné, inférieure donc à celle qu'il possède lorsqu'il en est infiniment éloigné, inférieure donc à zéro, c'est à dire négative.

$$\begin{aligned} E_p &= -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \times \frac{e^2}{r^2} \times r \\ &= -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \times \frac{e^2}{r} \end{aligned} \tag{4}$$

Nous avons vu plus haut que l'accélération centripète $\gamma{=}\omega^2\, r$ de l'électron. Cette accélération est due à la force électrostatique F_1 par l'intermédiaire de la relation qui lie les forces et les accélérations de masses pesantes, à savoir la relation fondamentale de la dynamique :

$$\vec{\Gamma} = \frac{\vec{F}}{m}$$

qui s'écrit ici :

$$\gamma = \frac{F_1}{m} \tag{5}$$

m étant la masse de l'électron, $m = 9,1080 \times 10^{-31}\,\mathrm{kg}$

Vous ne m'entendrez pas souvent parler de « force centriguge », si force centrifuge il y a, c'est le noyau qui la subit. Si on supprime instantanément le noyau d'un coup de baguette magique, l'électron filera tout droit (avec une trajectoire ortho-radiale et non pas radiale) et ce n'est certainement pas sous l'effet d'une quelconque « force centrifuge », c'est juste le principe qui veut qu'un corps en mouvement soumis à aucune force suit une trajectoire rectiligne à vitesse constante.

En rapprochant les équations (1) et (4) nous obtenons la condition d'équilibre de l'orbite :

$$\begin{aligned} \omega^2 r &= \frac{F_1}{m} \\ m\omega^2 r &= F_1 \end{aligned}$$

En remplaçant F_1 par sa valeur trouvée en (3) il vient :

$$m\omega^2 r = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \times \frac{e^2}{r^2}$$

Remplaçons ω par sa valeur $\omega = \frac{v}{r}$ touvée en (2) :

$$\begin{aligned} m\frac{v^2}{r^2}r &= \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \times \frac{e^2}{r^2} \\ \frac{mv^2}{r} &= \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \times \frac{e^2}{r^2} \\ mv^2 &= \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \times \frac{e^2}{r} \qquad (6) \end{aligned}$$

La vitesse v est donc telle que :

$$v^2 = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \times \frac{e^2}{mr} \tag{7}$$

L'énergie potentielle calculée en (4) peut donc s'écrire :

$$\begin{aligned} E_p &= -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \times \frac{e^2}{r} \\ &= -m \times \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \times \frac{e^2}{mr} \\ &= -mv^2 \end{aligned} \tag{8}$$

D'autre part l'énergie cinétique de l'électron de masse m a pour expression :

$$E_c = \frac{1}{2} m v^2 \tag{9}$$

L'énergie totale de l'électron vaut donc :

$$\begin{aligned} E &= E_c + E_p \\ &= \frac{1}{2} m v^2 - m v^2 \\ &= -\frac{1}{2} m v^2 \end{aligned} \tag{10}$$

Nous avons vu dès le départ (hypothèse de Louis de Broglie) que l'électron est associé à une onde (on peut dire qu'il se comporte comme une particule ou une onde, c'est suivant... c'est un objet quantique !) dont la longueur d'onde λ est reliée à la quantité de mouvement de la particule par la relation :

$$\lambda = \frac{h}{|\vec{p}|} = \frac{h}{p} \tag{11}$$

h étant la constante de Planck

et la quantité de mouvement valant :

$$\vec{p} = m\vec{v}$$

$$p = mv \tag{12}$$

(11) et (12) donnent :

$$\lambda = \frac{h}{mv} \tag{13}$$

soit :

$$\lambda^2 = \frac{h^2}{m^2 v^2} \tag{14}$$

dans cette expression, remplaçons v^2 par sa valeur $\frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \times \frac{e^2}{mr}$ calculée en (7) :

$$\begin{aligned} \lambda^2 &= \frac{h^2}{m^2} / (\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 mr}) \\ &= \frac{4\pi\varepsilon_0 h^2 mr}{m^2 e^2} \\ &= \frac{4\pi\varepsilon_0 h^2 r}{me^2} \end{aligned} \tag{15}$$

Nous allons maintenant poser une condition de résonnance sur λ, ce qui va nous permettre de calculer r.

La longueur l de l'orbite (supposée ciculaire) vaut :

$$l = 2\pi r \tag{16}$$

l doit être un multiple de λ de façon à obtenir une onde stationnaire stable :

$$l = n\lambda \tag{17}$$

(16) et (17) puis donnent :

$$2\pi r \;=\; n\lambda$$

élevons au carré :

$$4\pi^2 r^2 \;=\; n^2\,\lambda^2$$

remplaçons λ^2 par sa valeur trouvée en (15) :

$$4\pi^2 r^2 \;=\; n^2\,\frac{4\pi\varepsilon_0 h^2 r}{m e^2}$$

$$r \;=\; n^2\,\frac{\varepsilon_0 h^2}{\pi m e^2} \quad \text{avec } n \in \mathbb{N} \tag{18}$$

Le rayon r (mais aussi la vitesse, l'énergie, le rayonnement) ne peuvent prendre que des valeurs discrètes, dites « quantifiées » en fonction de la valeur du nombre entier n.

Ainsi n est un *nombre quantique* pour l'atome. Ce n'est pas le seul, il y en a d'autres qui définissent des modes de résonances plus complexes et se traduisent par des dédoublements des raies spectrales. Nous ne considèrerons ici que ce nombre quantique principal n .

Application numérique :

$e = 1,60217653 \times 10^{-19} C$

$m = 9,1093826 \times 10^{-31}\,\mathrm{kg}$

$\varepsilon_0 = 8,85374 \times 10^{-12}$

$h =$ 6,626068 $\times$10^{-34}

En faisant $n = 1$ nous obtenons le rayon de l'orbite la plus petite, dite première orbite de Bohr:

$$a_0 = \frac{8,85374 \times 10^{-12} \times (6,626068 \times 10^{-34})^2}{\pi \times 9,1093826 \times 10^{-31} \times (1,60217653 \times 10^{-19})^2}$$

$$= 5,2917 \times 10^{-11} m$$

soit environ 53 picomètres ($0,053$ nm)

On peut écrire le rayon r en fonction de cette orbite de Bohr :

$$r = n^2 a_0 \qquad (19)$$

Calcul du spectre d'émission

Nous avons vu en (10) que l'énergie totale de l'électron est égale à $-\frac{1}{2}mv^2$

La vitesse (7) comme le rayon est aussi quantifiée :

$$v^2 = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \times \frac{e^2}{mr}$$

Remplaçons r par sa valeur quantifiée trouvée en (18)

$$\begin{aligned} v^2 &= \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 m} / n^2 \frac{\varepsilon_0 h^2}{\pi m e^2} \\ &= \frac{1}{n^2} \times \frac{e^4}{4\varepsilon_0^2 h^2} \end{aligned} \tag{20}$$

soit :

$$v = \frac{1}{n} \times \frac{e^2}{2\varepsilon_0 h} \tag{21}$$

en posant $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ il vient: ($\hbar$ est la constante de Planck « réduite »)

$$v = \frac{1}{n} \times \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \times \frac{e^2}{\hbar} \tag{22}$$

Cette vitesse de l'ordre de $2,2 \times 10^6\, m\,/\,s$ (pour n=1) est non relativiste (0,7% c) mais elle est quand même étonnament grande, 2000 km/s (seconde, pas heure!) sur un cercle aussi petit de moins de un nanomètre! On peut donc s'attentre à une fréquence de révolution énorme. Calculons-la par curiosité:

$f = \frac{v}{2\pi r} = \frac{2,2 \times 10^6}{2\pi \times 5,2917 \times 10^{-11}} = 6,6 \times 10^{15}\mathrm{Hz}$

(attention, ce n'est pas la fréquence des photons émis lors de transitions de l'électron entre différentes orbites, quoi que du même ordre de grandeur que celle de photons UV, comme nous le verrons. Rappelons que tant que le photon reste sur une orbite stable il ne rayonne pas).

Calcul de l'énergie:

$$\begin{aligned} E &= -\frac{1}{2} m v^2 \\ &= -\frac{1}{n^2} \times \frac{m e^4}{8\varepsilon_0^2 h^2} \end{aligned} \tag{23}$$

ou, en posant $\hbar = \frac{h}{2\pi}$

$$E = -\frac{1}{n^2} \times \frac{m e^4}{32\pi^2 \varepsilon_0^2 \hbar^2} \tag{24}$$

L'énergie maximale pour $n = 1$ est égale à l'énergie d'ionisation, elle vaut:

$$E_0 = -\frac{m e^4}{32\pi^2 \varepsilon_0^2 \hbar^2} = -13,61\,\mathrm{eV}$$

et l'énergie E s'écrit alors:

$$E = \frac{1}{n^2} E_0$$

Rayonnement

L'électron peut se trouver sur une des orbites permises correspondant à une valeur de n entière.

Un apport extérieur d'énergie (un photon incident) le fera sauter sur une orbite plu éloignée du noyau, et il « retombera » spontanément sur une orbite plus basse en émettant un photon d'énergie égale à la différence d'énergie entre celle qu'il avait sur l'orbite de départ et celle qui lui reste sur l'orbite d'arrivée.

Si donc on considère les valeurs p et q du nombre quantique n correspondant à ces énergies de départ et d'arrivée, p et q étant des nombres entiers, on obtient des photons émis ayant comme énergie :

$$\begin{aligned}\Delta E = E_p - E_q &= \frac{1}{p^2}E_0 - \frac{1}{q^2}E_0 \\ &= (\frac{1}{p^2} - \frac{1}{q^2})E_0\end{aligned}$$

Le photon émis aura une fréquence telle que

$$h\nu = \Delta E$$

Les fréquences émises seront donc :

$$\nu = \frac{E_0}{h}(\frac{1}{p^2} - \frac{1}{q^2})$$

Et la longueur d'onde des photons émis sera :

$$\lambda = \frac{c}{\nu}$$

c = vitesse de la lumière dans le vide = $299792458\,m/s$

Calculons toutes ces valeurs avec un tableur :

CONSTANTES		
e	1,602176530E-019	C
m	9,109382150E-031	kg
εo	8,854187000E-012	
h	6,626068000E-034	
c	2,997924580E+008	
1eV	1,602200000E-019	J
Valeurs calculées		
Ro	5,291769777E-011	m
Eo(j)	2,179873239E-018	J
Eo(eV	13,605500	eV

p	q	1/p²-1/q²	Delta E (eV)	Freq Hz	Freq THz	lambda (nm)		SERIE
1	2	0,750000	10,204	2,467383E+15	2467,38	121,50	UV	Lyman
1	3	0,888889	12,094	2,924306E+15	2924,31	102,52	UV	Lyman
1	4	0,937500	12,755	3,084229E+15	3084,23	97,20	UV	Lyman
1	5	0,960000	13,061	3,158251E+15	3158,25	94,92	UV	Lyman
1	6	0,972222	13,228	3,198460E+15	3198,46	93,73	UV	Lyman
1	7	0,979592	13,328	3,222705E+15	3222,7	93,03	UV	Lyman
2	3	0,138889	1,890	4,569228E+14	456,92	656,11	visible	Balmer
2	4	0,187500	2,551	6,168458E+14	616,85	486,01	visible	Balmer
2	5	0,210000	2,857	6,908673E+14	690,87	433,94	visible	Balmer
2	6	0,222222	3,023	7,310765E+14	731,08	410,07	visible	Balmer
2	7	0,229592	3,124	7,553214E+14	755,32	396,91	visible	Balmer
3	4	0,048611	0,661	1,599230E+14	159,92	1874,61	IR	Paschen
3	5	0,071111	0,968	2,339445E+14	233,94	1281,47	IR	Paschen
3	6	0,083333	1,134	2,741537E+14	274,15	1093,52	IR	Paschen
3	7	0,090703	1,234	2,983986E+14	298,4	1004,67	IR	Paschen

Toutes ce valeurs découlent du résultat Eo=13,6 eV.

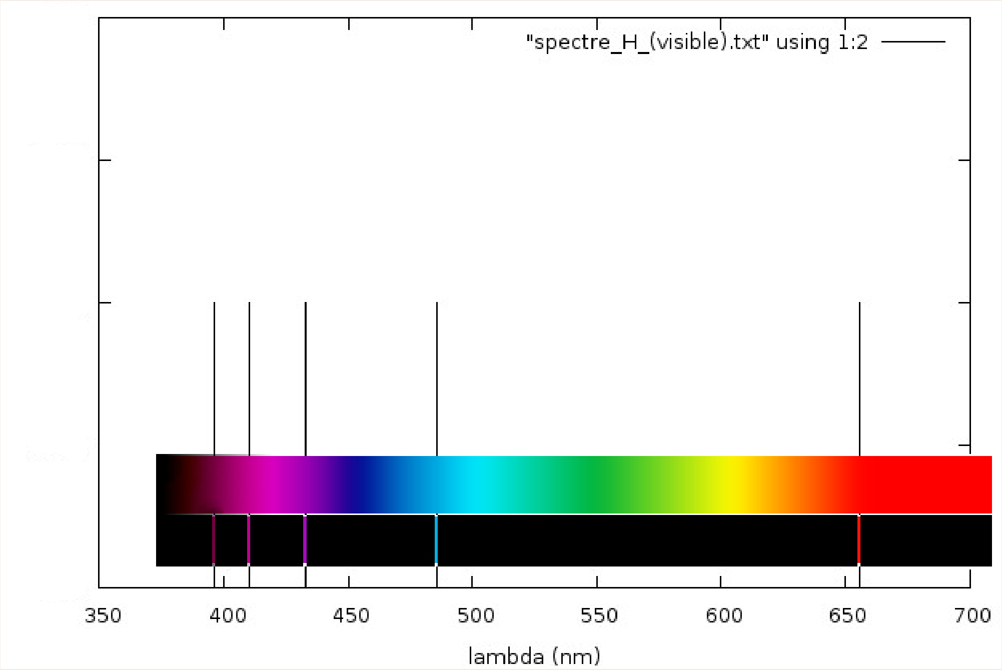
Les valeurs données dans la littérature scientifique sont très très légèrement différentes)

Les longueurs d'ondes comprises entre 400 et 700 nm se trouvent dans le domaine visible par l'Homme. Elles correspondent à des transitions entre les orbites 3, 4, 5, 6, 7 et l'orbite 2. Les raies spectrales correspondantes forment la série dite “de Balmer".

Voici la partie du spectre rayonné correspondant à cette série de Balmer (tracé automatiquement avec GNUplot):

Seules les trois raies les plus à droites sur ce graphique sont vraiment visibles. J'ai rajouté les couleurs approximativement...

La raie la plus lumineuse (rouge à 658,28 nm) qui correspond au saut entre le troisième et le second niveau d'énergie est appelée H alpha.
Elle est bien connue des astronomes qui utilisent des filtres adaptés pour augmenter le contraste des nébuleuses rayonnant principalement à cette longueur d'onde.



Bibliographie :

- Le cours de Physique de FEYNMAN. mécanique quantique. Chapitre 19: l'Atome d'hydrogène. DUNOD (2000) - Dans lequel Feynman résout l'équation de Schrödinger.

- Le cours de Physique de FEYNMAN. mécanique quantique. Chapitre 2: La relation entre les points de vue ondulatoire et corpusculaire. Dans lequel Richard Feynman calcule la taille de l'atome d'hydrogène d'un manière surprenante (en trois lignes, par le calcul du minimum d'énergie en annulant sa dérivée)
- PHYSIQUE MP2/PC2 tome 2: caractère quantique - matière et rayonnement. par C Janot et M. Gerl collection HACHETTE UNIVERSITE (1970) (grand classique des universités)
- PHYSIQUE Terminale C.E (1983) Auteurs: Alain Pénigaud, Lucien Quaranta, Jean Duboc. chez FERNAND NATHAN