

Chapitre 2 : Quantification de l'énergie de l'atome d'hydrogène

I Spectre de l'atome d'hydrogène

A) Quantification du spectre de l'atome d'hydrogène

Spectre d'une source lumineuse :

{ λ ou ν qui composent l'onde électromagnétique de la source}

On peut avoir un spectre continu (lampe thermique, soleil), ou un spectre de raies (discontinues, lampe à sodium ou mercure-cadmium)

Le spectre de l'hydrogène est un spectre de raies, qu'on a regroupées par séries : Lyman (UV), Balmer (Visible), Paschen, Brackett (IR)...

La position de toutes les raies s'obtient par une formule simple, la formule de Rydberg-Ritz :

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) \text{ (où } n \text{ et } m \in \mathbb{N}^* \text{ et tels que } n < m \text{)}$$

$R_H = 10979708,01 \text{ m}^{-1}$: constante de Rydberg

Remarque :

Pour $n = 1$, on retrouve la série de Lyman

Pour $n = 2$, la série de Balmer...

B) Interprétation du spectre de l'hydrogène

Niels Bohr a posé deux affirmations :

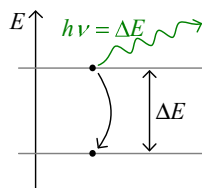
Postulat mécanique :

L'électron de l'atome d'hydrogène ne possède qu'un nombre limité d'états accessibles.

Chaque état possède une énergie invariante (quantification des niveaux d'énergie de l'hydrogène)

Postulat optique :

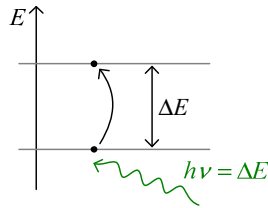
La transition entre deux états accessibles s'accompagne de l'absorption ou de l'émission d'un photon d'énergie égale à la différence de l'énergie des deux états.



Il y a ici une transition d'un état d'énergie élevée vers un état d'énergie plus faible.

Il y a émission d'un photon d'énergie $h\nu = \Delta E$. ($h = 6,62 \cdot 10^{-34} \text{ kg.m}^2.\text{s}^{-1}$)

Inversement :



Ici, un photon est absorbé.

On considère l'émission d'un photon :

$$E_{\text{photon}} = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = hc \left(R_H \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) \right) \quad (n < m \in \mathbb{N}^*)$$

$$= \underbrace{\frac{-R_H hc}{m^2}}_{E_{\text{initial}}=E_m} - \underbrace{\frac{-R_H hc}{n^2}}_{E_{\text{final}}=E_n}$$

On peut l'interpréter comme une transition entre l'état initial (m) d'énergie E_m et l'état final (n) d'énergie E_n .

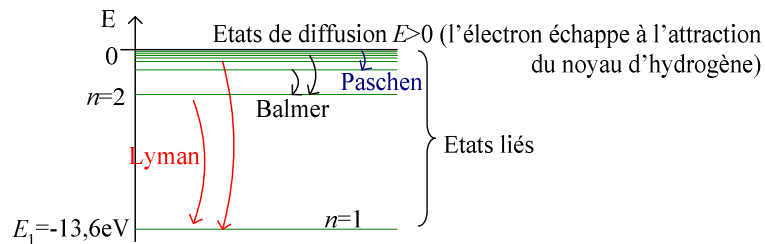
C) Diagramme des niveaux d'énergie de l'atome d'hydrogène

Les états sont indexés par $n \in \mathbb{N}^*$, d'énergie $E_n = \frac{-R_H hc}{n^2} = \frac{-13,6\text{eV}}{n^2}$

Pour $n=1$: $E_1 = -13,6\text{eV}$: c'est l'état fondamental

Les états $n > 1$ correspondent à des états excités.

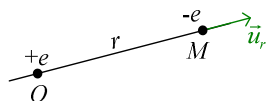
Lorsque $n \rightarrow +\infty$, $E \rightarrow 0$.



II Modèle de Bohr de l'atome d'hydrogène

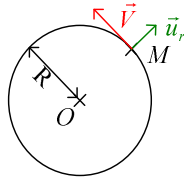
A) Modèle planétaire

On considère un proton ponctuel en O , de charge $+e$, un électron ponctuel en M , de charge $-e$. On suppose O fixe dans le référentiel du laboratoire.



$$\vec{F}_{p \rightarrow e} = \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \vec{u}_r \quad (\text{force attractive, newtonienne}).$$

L'électron décrit donc une trajectoire elliptique. Si la trajectoire est circulaire, de rayon R et de vitesse V :



$$E_m = \frac{-k}{2a} \text{ avec } \begin{cases} k = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \\ a = R \end{cases}$$

$$= \frac{-e^2}{8\pi\epsilon_0 R}$$

$$E_p = \frac{-k}{R} = \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0 R} = 2E_m$$

$$E_c = \frac{1}{2} m_e V^2 = E_m - E_p = -E_m = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 R}$$

Ainsi, toutes les valeurs de R sont possibles, et E peut prendre toutes les valeurs entre 0 et $-\infty$.

B) Quantification du moment cinétique

Hypothèse de Bohr : le moment cinétique $\vec{\sigma}_0$ est quantifié, et $\sigma_0 = n\hbar$, $n \in \mathbb{N}^*$

($\hbar = \frac{h}{2\pi}$: constante de Planck réduite)

$\vec{\sigma}_0 = \overrightarrow{OM} \wedge m_e \vec{V}$. Pour un mouvement circulaire :

$\vec{\sigma}_0 = m_e R V \vec{k}$, où \vec{k} est un vecteur unitaire perpendiculaire au plan orbital.

$$\sigma_0^2 = n^2 \hbar^2, \quad \sigma_0^2 = m_e^2 R^2 V^2$$

$$\text{et } \frac{1}{2} m_e V^2 = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 R}$$

$$\text{Donc } n^2 \hbar^2 = 2m_e R^2 \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 R}$$

$$\text{D'où } R = \frac{n^2 \hbar^2 4\pi\epsilon_0}{m_e e^2} = n^2 a_0 \text{ avec } a_0 = \frac{\hbar^2 4\pi\epsilon_0}{m_e e^2} : \text{ rayon de Bohr}$$


$$\text{D'où } E_m = \frac{-e^2}{8\pi\epsilon_0 R} = \frac{-m_e e^4}{8\epsilon_0^2 \hbar^2} \times \frac{1}{n^2}, \text{ et on a aussi } E_n = \frac{-R_H hc}{n^2}.$$

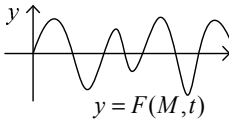
$$R_{H \text{ théorique}} = \frac{m_e e^4}{8\epsilon_0^2 \hbar^3 c} \approx R_{H \text{ exp}} \text{ à } 10^{-10} \text{ près (avec } m = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} : \text{ le proton n'est pas}$$

réellement fixe, d'où les erreurs)

III Notions de mécanique quantique

En mécanique quantique, la matière est constituée de particules, qui sont des ondes.

Mécanique classique  Relation Fondamentale de la Dynamique

Mécanique quantique  Equation de Schrödinger/
Equation de Schrödinger stationnaire

$\psi(x, y, z, t)$: fonction d'onde de la particule, définie en tout point de l'espace.

A) Probabilité de présence

Soit une particule quantique dans un état stationnaire, de fonction d'onde $\psi(x, y, z)$ (indépendant du temps). On mesure la position de cette particule.

On a alors une probabilité $dP = |\psi(x, y, z)|^2 dV$ de la trouver dans un volume dV .

En faisant un grand nombre de mesures, on trouve une position moyenne M_0 avec une dispersion $\|\Delta\vec{r}\|$ autour de la position moyenne :



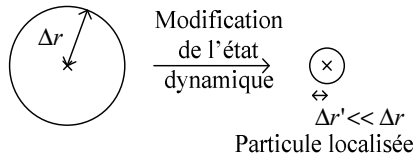
$\|\Delta\vec{r}\|$ est l'extension de la fonction d'onde de la particule.

B) Relation d'incertitude de Heisenberg

En mécanique relativiste, par définition : $E_c^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4$ (où p est la quantité de mouvement, définie par $p = \gamma m v$, où $\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$).

Si $v \ll c$ (mécanique classique), un développement limité donne alors $E_c = mc^2 \sqrt{\gamma^2 \frac{v^2}{c^2} + 1} \approx mc^2 (1 + \frac{v^2}{2c^2} \underbrace{\gamma^2}_{\approx 1}) \approx mc^2 + \frac{1}{2} mv^2$ (à une constante additive près).

Pour des photons (masse nulle, vitesse c), on a $E_c = pc$, soit $p = \frac{E_c}{c}$



Plus la particule est localisée, moins on connaît sa quantité de mouvement :

$\Delta r \times \Delta P \gtrsim \hbar$ (Relation d'incertitude de Heisenberg)

Ainsi, pour la diffraction : lorsque la particule passe la fente, elle est plus localisée, mais en sortant, on ne peut pas connaître sa direction avec précision (et plus la fente est petite, plus la diffraction est importante)

Autre relation d'incertitude : $\Delta E \times \Delta t \gtrsim \hbar$ (ΔE : énergie ; Δt : durée)