ETUDE DE L'ATOME D'HYDROGENE ET DES HYDROGENOUIDES

1. Historique
2. **Théorie de Bohr**
    - **Spectre de l'hydrogène**
    - **Rayonnement dans la théorie de Bohr**
    - **Entrainement du noyau**
3. Etude quantique
4. Moment orbital de l'électron et effet Zeeman
5. Spin de l'électron

2. THEORIE DE BOHR

2.1. Spectre de l'hydrogène

Au cours de la décharge électrique (**Figure III.1**) dans un gaz d'hydrogène, toutes les longueurs d'onde des spectres peuvent être données par une relation empirique simple dite la formule de Rydberg.

$$\frac{1}{\lambda} = R\left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_j^2}\right)$$

où λ est la longueur d'onde de la raie spectrale dans le vide.
$R = 1{,}0967758 \cdot 10^{-3}\ A^{-1}$ est la constante expérimentale de Rydberg de l'hydrogène.
n_i et n_j sont des entiers tels que $n_i < n_j$.
Pour $n_i = 1, n_j > 1$, on obtient une série de spectre appelée série de Lyman (spectre ultraviolet)
Pour $n_i = 2, n_j > 2$, la série de spectre est appelée série de Balmer (spectre visible)
Pour $n_i = 3, n_j > 3$, la série de spectre est appelée série de Paschen (spectre infrarouge)

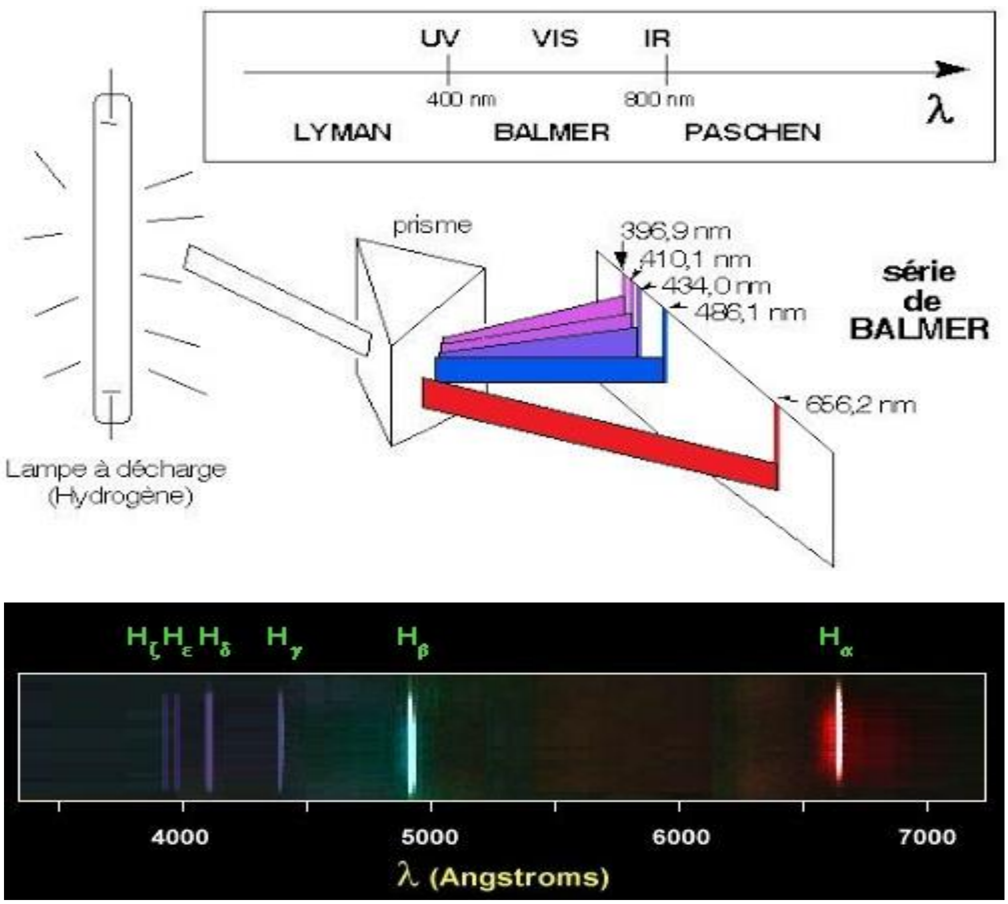


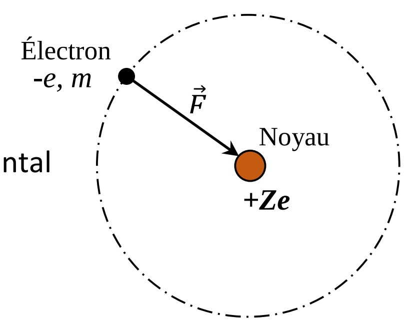
Figure III.1 : Schéma de la décharge électrique dans un gaz d'hydrogène et le spectre d'émission de l'atome d'hydrogène.

2.2. Atome de Bohr

En 1913 Bohr à élaborer une théorie à partir de laquelle il est possible d'obtenir la formule de Rydberg. La théorie de Bohr est basé sur un modèle de type planétaire où l'électron tourne autour de son noyau dans une orbitale circulaire et maintenu sur son orbite par la force de Coulomb attractive $\vec{F}$ avec :

$$F = k\frac{Ze^2}{r^2} \qquad (III.1)$$

Où $k = 9 \cdot 10^9\ N \cdot m^2 \cdot C^{-2}$, est la constante de Coulomb,
Z, e, r sont respectivement le numéro atomique,
la charge électrique élémentaire et le rayon atomique.
On peut calculer la vitesse orbitale à partir du principe fondamental de la dynamique : (La force de Coulomb = La force centrifuge)



$$k\frac{Ze^2}{r^2} = \frac{mv^2}{r}$$

Avec $m = 9{,}109 \times 10^{-31} kg$, est la masse de l'électron, d'où

$$v^2 = k\frac{Ze^2}{m\,r} \qquad (\mathrm{III}.2)$$

L'énergie potentielle électrostatique de l'électron à une distance r du noyau est :

$$E_p = -k\frac{Ze^2}{r} \qquad (\mathrm{III}.3)$$

L'énergie cinétique de l'électron :

$$E_c = \frac{mv^2}{2}$$

De l'équation $(\mathrm{III}.2)$ on obtient :

$$E_c = \frac{kZe^2}{2r} \qquad (\mathrm{III}.4)$$

Finalement l'énergie totale (mécanique) :

$$E_T = E_c + E_p = \frac{kZe^2}{2r} - k\frac{Ze^2}{r}$$

$$E_T = E = -\frac{kZe^2}{2r} \qquad (\mathrm{III}.5)$$

Nous arrivons maintenant au point ou le modèle de Bohr s'écarte radicalement d'une représentation classique. Bohr avait posé en postulat que les seules orbites permises devaient satisfaire à la relation :

$$mvr = \frac{nh}{2\pi} \qquad (III.6)$$

Ou n est un entier positif non nul représentant la couche où se situe l'électron, et h est la constante de Planck. Les orbites sont donc "*quantifiées*" par le nombre entier n positif appelé nombre quantique principal.

Des équations $(\mathrm{III}.2)$, $(\mathrm{III}.5)$ et $(\mathrm{III}.6)$ on peut obtenir

D'un coté

$$v = \frac{nh}{2\pi mr}$$

$$v^2 = \frac{n^2h^2}{(2\pi mr)^2} \qquad (\mathrm{III}.7)$$

Et d'autre

$$v^2 = k\frac{Ze^2}{m\,r}$$

Alors

$$r = \frac{n^2h^2}{4\pi^2kZe^2m} \equiv r_n \qquad (\mathrm{III}.8)$$

D'où on peut écrire

$$r_n = \frac{n^2}{Z}r_1 \quad avec \quad r_1 = \frac{h^2}{4\pi^2ke^2m}$$

De l'équation $(\mathrm{III}.5)$ et $(\mathrm{III}.8)$

$$E = -\frac{2\pi^2k^2Z^2e^4m}{n^2h^2} \equiv E_n \qquad (\mathrm{III}.9)$$

Pour l'atome d'hydrogène, $Z = 1$, les équations $(\mathrm{III}.8)$ et $(\mathrm{III}.9)$ donnent :

$$r_1 = 0{,}529\ A° \quad et \quad E_1 = -13{,}58\ eV$$

Ces résultats sont en bon accord avec les déterminations expérimentales.

2.3. Rayonnement dans la théorie de Bohr

L'électrodynamique classique prédisait qu'une charge en orbite devrait émettre un rayonnement dont la fréquence est celle de sa révolution, ce qui a comme conséquence, une perte continue de l'énergie, qui va finir par la chute de l'électron sur le noyau, qui n'est absolument pas vrai. L'électrodynamique classique doit donc être modifiée à l'échelle atomique. Bohr fit l'hypothèse que *l'atome n'émet de l'énergie que lorsque l'électron initialement sur une orbite stable permise E_j passe sur une autre orbite E_i plus faible*

$$hc/\lambda = E_j - E_i \qquad (\text{III}.10)$$

Ou

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{E_j - E_i}{hc}$$

De l'équation $(\text{III}.9)$ on obtient :

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{2\pi^2 k^2 Z^2 e^4 m}{\text{c}\, h^3}\left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_j^2}\right) \qquad (\text{III}.11)$$

Ou on peut écrire

$$\frac{1}{\lambda} = R_H\, Z^2\left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_j^2}\right) \qquad (\text{III}.12)$$

R_H est la constante trouvée par Bohr équivalente à la constante de Rydberg, avec

$$R_H = \frac{2\pi^2 k^2 e^4 m}{\text{c}\, h^3} = 1{,}09737\,.\,10^{-3}\,A^{-1}$$

On voit que cette valeur est très proche de la valeur expérimentale de Rydberg

Atomes Hydrogenoïdes

Un atome Hydrogenoïde est un atome qui est dépouillé de tous ses électrons à l'exception d'un seul, comme **l'hélium** ionisé $(He^{+}\ ;\ Z = 2\,)$, le **lithium** ionisé $(Li^{+2}\ ;\ Z = 3)$; et le **béryllium** ionisé $(Be^{+3}\ ;\ Z = 4)$, etc.. La théorie de Bohr est applicable à ces atomes.

2.4. Entrainement du noyon

Dans cette étude, le noyon chargé positivement était supposé suffisamment lourd par rapport à l'électron pour être considéré infiniment lourd. Si on prend en considération la masse finie du noyon, le mouvement du système électron-noyau distants de r équivalent à celui d'une particule de masse réduite μ orbitant à une distance r autour du centre de masse G (**Figure III.2**):

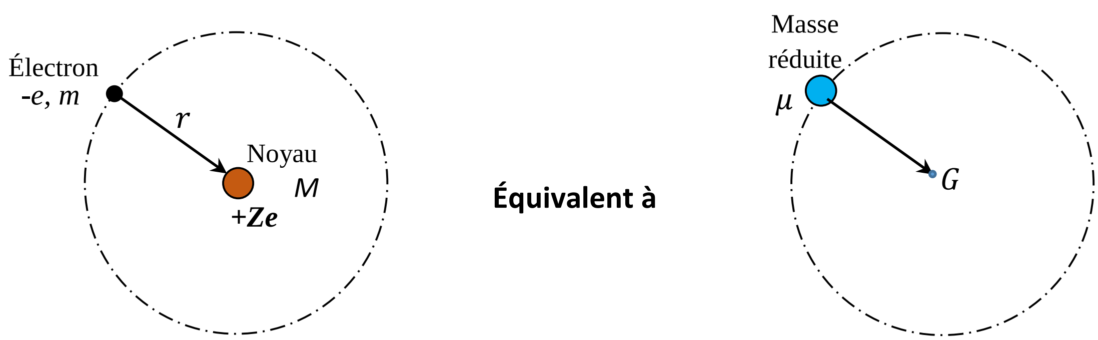


Figure III.2 : Schéma représentant l'équivalence du mouvement du système électron-noyau distants de r à celui d'une particule de masse réduite μ orbitant autour de G.

Ou la masse réduite est

$$\mu = \frac{mM}{m+M} = \frac{m}{1+{}^{m}/_{M}} \qquad \text{(III. 13)}$$

Avec (m) et (M) les masses de l'électron et du noyau respectivement, pour l'hydrologie,

$$\frac{m}{M} = \frac{1}{1836}$$

La constante trouvée par Bohr (équivalente à la constante de Rydberg) en considérant la masse du noyon est :

$$R_H = \frac{2\pi^2 k^2 e^4}{\mathrm{c}\, h^3}\mu = \frac{2\pi^2 k^2 e^4}{\mathrm{c}\, h^3}\left(\frac{m}{1+{}^{m}/_{M}}\right) = \frac{2\pi^2 k^2 e^4 m}{\mathrm{c}\, h^3}\left(\frac{1}{1+{}^{m}/_{M}}\right)$$

$$R_H = R_\infty\left(\frac{1}{1+{}^{m}/_{M}}\right) = 1{,}09737\,.\,10^{-3}\left(\frac{1}{1+{}^{1}/_{1836}}\right) = 1{,}0968\,.\,10^{-3}$$

Avec R_∞ et la constante trouvée par Bohr en considérant la masse du noyon $M = \infty$.
On voit que la constante de Bohr R_H (en considérant la masse du noyon **finie**) et plus proche de la valeur expérimentale de Rydberg, que l'ancien constante de Bohr R_∞.