Atome d'hydrogène : modèle de Yukawa

Le potentiel électrostatique $V(r)$ créé par un atome d'hydrogène (supposé à symétrie sphérique) peut être décrit par le potentiel de Yukawa :

$$V(r) = \frac{q_0}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^{-r/a}}{r}$$

avec q_0 la charge élémentaire (que l'on ne note pas e pour ne pas confondre avec l'exponentielle).

1) Déterminer $V(r)$ dans les cas limites $r \ll a$ et $r \gg a$. Interpréter les résultats.

2) Déterminer le champ électrostatique associé.

3) Déterminer la charge $q(r)$ se trouvant à l'intérieur d'une sphère de rayon r.

4) En déduire la présence d'une charge ponctuelle au centre du repère. Que modélise-t-elle ? Calculer la charge totale contenue dans tout l'espace. Interpréter.

5) Déterminer la densité volumique de charge $\rho(r)$ et la tracer. Que représente physiquement a ?

Donnée : en coordonnées sphérique, avec $\overrightarrow{A} = A_r(r)\,\overrightarrow{u_r}$

$$\text{div}\left(\overrightarrow{A}\right) = \frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2 A_r\right)$$

Correction

Une question ? Un soucis de QRCode ? nicolasperrissin@gmail.com

Correction

1) On a :

$$V(r \ll a) = \frac{q_0}{4\pi\varepsilon_0 r} \quad \text{et} \quad V(r \gg a) = 0$$

Pour $r \ll a$, le potentiel diverge, signe qu'il existe une charge ponctuelle au centre du repère (le proton du noyau). Pour $r \gg a$, le potentiel tend vers 0, signe que la distribution de charge est localisée dans l'espace (normale pour un atome).

2) On a :

$$\overrightarrow{E} = -\overrightarrow{\text{grad}}(V) \quad \Rightarrow \quad \boxed{\overrightarrow{E} = -\frac{dV}{dr}\overrightarrow{u_r} = \frac{q_0}{4\pi\varepsilon_0}\left(\frac{1}{r^2} + \frac{1}{ar}\right)e^{-r/a}\,\overrightarrow{u_r}}$$

3) On applique le théorème de Gauss sur une sphère de centre O et de rayon r. L'élément de surface vaut : $\overrightarrow{dS} = dS\,\overrightarrow{u_r}$.

$$\iint \overrightarrow{E}\cdot\overrightarrow{dS} = \frac{q_{int}}{\varepsilon_0} \quad \Rightarrow \quad 4\pi r^2\,E(r) = \frac{q(r)}{\varepsilon_0}$$

On en déduit :

$$\boxed{q(r) = q_0\left(1 + \frac{r}{a}\right)e^{-r/a}}$$

4) Lorsque $r \to 0$, $q \to q_0$. Il existe donc au centre une charge q_0 ponctuelle. Il s'agit du noyau (un proton) de l'atome d'hydrogène, supposé ponctuel.

La charge contenu dans tout l'espace est donnée par : $q(r = \infty) = 0$. L'atome est globalement neutre (un proton et un électron).

5) Deux méthodes. Soit on se souvient que :

$$dV = 4\pi r^2 dr \quad \Rightarrow \quad \rho(r) = \frac{dq}{dV} = \frac{q_0}{4\pi r^2}\frac{d}{dr}\left[\left(1 + \frac{r}{a}\right)e^{-r/a}\right]$$

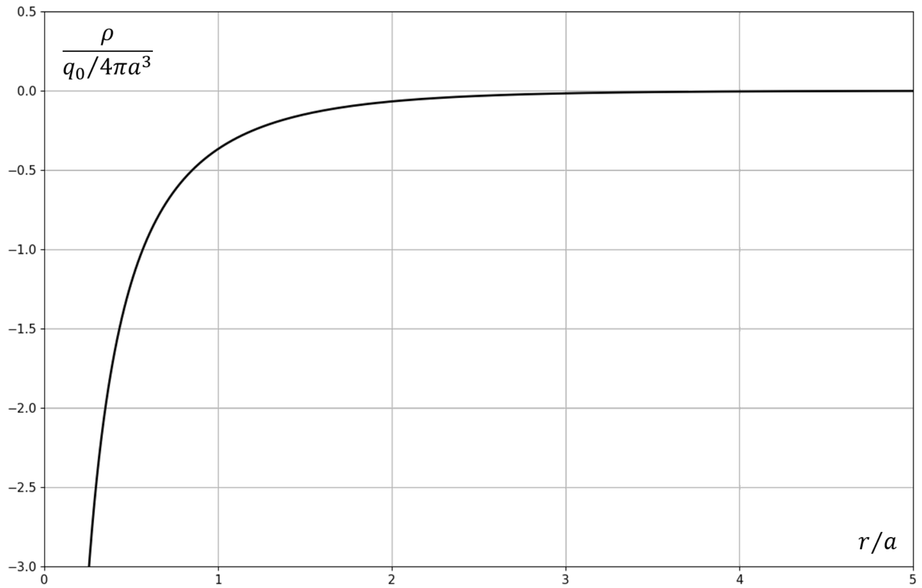
$$\Rightarrow \quad \boxed{\rho(r) = -\frac{q_0}{4\pi a^2}\frac{e^{-r/a}}{r}}$$

Soit on utilise l'équation de Maxwell-Gauss avec l'indication de l'énoncé :

$$\text{div}\left(\overrightarrow{E}\right) = \frac{\rho}{\varepsilon_0} \quad \Rightarrow \quad \rho(r) = \frac{\varepsilon_0}{r^2}\frac{d}{dr}\left[r^2 E\right] = \frac{q_0}{4\pi r^2}\frac{d}{dr}\left[\left(1 + \frac{r}{a}\right)e^{-r/a}\right]$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{\rho(r) = -\frac{q_0}{4\pi a^2}\frac{e^{-r/a}}{r}}$$

Graphe :



Pour $r \neq 0$, $\rho(r)$ représente la densité de charge de l'électron (car le proton est ponctuel en O). La densité de charge est bien en tout point négative et décroît exponentiellement vite, avec une distance caractéristique a.

Dans une approche quantique de l'atome, l'électron ne peut plus être décrit comme une particule ponctuelle parfaitement localisée en un point M mais par une fonction d'onde, qui traduit la probabilité de le détecter autour de M. La densité volumique de probabilité de présence $\mathcal{P}(M)$ vaut :

$$\mathcal{P}(M) = \frac{\rho(M)}{-q_0} = \frac{1}{4\pi a^2}\frac{e^{-r/a}}{r}$$

La probabilité de présence de l'électron est donc maximale proche du noyau et décroît exponentiellement vite, avec une distance caractéristique a. Cette distance représente donc la distance typique au-delà de laquelle il est très improbable de trouver l'électron. Il s'agit de la taille typique de l'orbitale $1s$ de l'atome d'hydrogène.