

MECANISME DE FORMATION DE L'HYDROGENE MOLECULAIRE DANS LE MILIEU INTERSTELLAIRE

L'hydrogène atomique est le composant principal de la matière très diluée qui se trouve entre les étoiles (environ 1 atome cm^{-3}). Paradoxalement pourtant, dès que ce milieu est un peu plus concentré (> 10 atomes cm^{-3}) l'hydrogène atomique n'apparaît plus qu'à l'état de traces. En effet, il s'est alors essentiellement transformé en hydrogène moléculaire. Le mécanisme de cette transformation a longtemps été une énigme. On pourrait penser qu'elle a lieu directement au cours de collisions entre les atomes d'hydrogène dans la phase gazeuse du milieu interstellaire. Cependant, des règles de sélection interdisent l'évacuation sous forme de rayonnement électromagnétique de l'énergie correspondant à l'énergie de liaison de la molécule (4,5 eV).

En 1963, Gould et Salpeter proposent un autre mécanisme qui permet cette association à la surface des grains de poussière présents dans le milieu interstellaire : en effet, dans les nuages du milieu interstellaire, environ 1 % de la masse se trouve sous forme de grains de poussière d'environ 1 μm , probablement enveloppés dans un manteau de glace.

Pour évaluer les ordres de grandeur, nous allons donc supposer que les atomes du milieu interstellaire peuvent être **adsorbés** à la surface d'un cristal formés d'atomes régulièrement espacés, **l'énergie cinétique de l'atome étant transmise sous forme d'énergie de vibration au cours de l'adsorption**. Les grains de poussière servent alors de catalyseurs à la formation de molécules H_2 .

NOTE IMPORTANTE :

Dans tout ce qui suit, on appelle énergie de l'atome d'hydrogène l'énergie de l'objet "atome d'hydrogène" dans le potentiel du cristal. On ne se préoccupe pas des niveaux d'énergie interne de l'atome qui est supposé être dans son état fondamental dans tout le problème.

1-/ On admet que la force entre l'atome d'hydrogène et chacun des atomes du cristal est une force de **type Van der Waals**, et on décrit le potentiel d'interaction correspondant par une expression dite de **Lennard-Jones** :

$$\Phi(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (\varepsilon > 0)$$

a) Montrer que ce potentiel présente un minimum pour une distance r_0 que l'on calculera. Dessiner l'allure de $\Phi(r)$. On prendra $\varepsilon = 7 \cdot 10^{-2}$ eV et $\sigma = 3$ Å.

b) On suppose que la surface du cristal est plane, et que les atomes de la surface sont répartis aux sommets d'un réseau carré de maille p , le réseau du cristal étant cubique simple. On prendra $p = 3$ Å.

Par des arguments qualitatifs, indiquer quelles sont les positions possibles pour les minima du potentiel d'interaction de l'atome d'hydrogène avec le cristal, dans un plan parallèle à sa surface.

c) On décrit ce potentiel d'interaction avec le cristal au voisinage de la surface du cristal (définissant le plan $z = 0$) par l'expression suivante :

$$V(x, y, z) = f(x) + f(y) + \Phi(z)$$

avec :

$$f(x) = \frac{\varepsilon}{4} \left(1 - \cos \frac{2\pi x}{p} \right) \text{ et } f(y) = \frac{\varepsilon}{4} \left(1 - \cos \frac{2\pi y}{p} \right)$$

et où $\Phi(z)$ est un potentiel de type **Lennard-Jones** :

$$\Phi(z) = 4\varepsilon \left(\left(\frac{\sigma}{z} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{z} \right)^6 \right)$$

On fera l'approximation de remplacer le potentiel au voisinage d'un minimum par l'expression ci-dessus, où apparaissent trois potentiels harmoniques :

$$W_{(x,y,z)} = C + \frac{1}{2} m\omega_x^2 x^2 + \frac{1}{2} m\omega_y^2 y^2 + \frac{1}{2} m\omega_z^2 (z - z_0)^2$$

Calculer C , ω_i^2 , ($i = x, y, z$) et z_0 en fonction des données du problème.

Trouver l'énergie E_0 de l'état fondamental de l'atome d'hydrogène adsorbé sur le cristal. On pourra prendre $\hbar c = 2 \cdot 10^3$ eV et $mc^2 = 1$ GeV. (c est la vitesse de la lumière).

d) Quelle énergie faut-il fournir à l'atome pour qu'il atteigne le premier niveau excité dans le potentiel du cristal ? La température des grains de poussière du milieu interstellaire étant de l'ordre de 20 K, un atome du cristal peut-il fournir cette énergie à l'atome d'hydrogène grâce à son agitation thermique ?

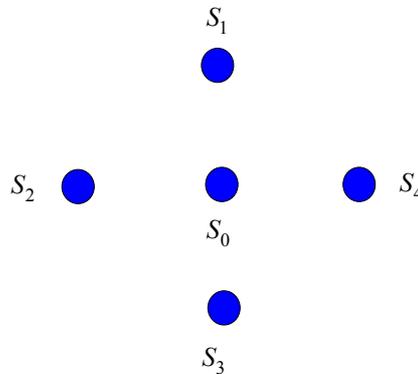
(On rappelle que, pour $T = 300$ K, on a $kT = \frac{1}{40}$ eV).

2-1 Pour former des molécules d'hydrogène à la surface des grains, les atomes doivent se rencontrer et par conséquent se déplacer horizontalement en x et y .

a) Par quel mécanisme peut-on avoir une mobilité à la surface des grains ?

Afin de juger de l'efficacité de ce mécanisme, nous allons évaluer un ordre de grandeur du temps que mettra un atome d'hydrogène pour passer d'un site au site voisin.

Nous utiliserons pour cela un modèle de cristal très simplifié, dans lequel l'atome d'hydrogène, situé à l'instant $t = 0$ dans le site s_0 (cf. figure), ne peut évoluer au cours du temps que vers les sites voisins s_1 , s_2 , s_3 et s_4 . On ne tient pas compte de l'existence des autres sites dans le réseau.



On désigne par $|\Phi_0\rangle$, $|\Phi_1\rangle$, ... $|\Phi_4\rangle$ les cinq états (normés et orthogonaux) de cet atome, s'il est dans l'état fondamental calculé en **1c**) et situé sur les sites s_0 , s_1 , ... s_4 . Lorsqu'on néglige la possibilité pour l'atome de sauter d'un site à l'autre, les cinq états $|\Phi_i\rangle$ sont états propres de son Hamiltonien \hat{H}_0 , avec la même valeur propre E_0 calculée précédemment.

Le couplage entre l'état $|\Phi_0\rangle$ et les états $|\Phi_1\rangle$, ... $|\Phi_4\rangle$ modifie l'Hamiltonien auquel on doit rajouter un terme \hat{H}_1 défini de la façon suivante :

$$\hat{H}_1 |\Phi_0\rangle = -a(|\Phi_1\rangle + |\Phi_2\rangle + |\Phi_3\rangle + |\Phi_4\rangle) \quad , \quad \hat{H}_1 |\Phi_i\rangle = -a |\Phi_0\rangle \quad i = 1, 2, 3, 4$$

Le terme a est une quantité réelle positive. On néglige les autres couplages possibles.

b) Calculer les niveaux d'énergie de l'hamiltonien $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$.

c) Écrire les états propres normalisés correspondants de \hat{H} en fonction des états $|\Phi_i\rangle$.

d) L'atome d'hydrogène se trouve à l'instant $t = 0$ sur le site s_0 . Écrire son état $|\Psi(t)\rangle$ à l'instant t en fonction des états propres de \hat{H} . Discuter la localisation de l'atome à l'instant t . Au bout de quel temps T peut-on dire que l'atome a changé de site ?

On prendra $4a = 5 \cdot 10^{-5}$ eV.

3-1 a) Sachant que le grain de poussière a des dimensions de l'ordre du micron, donner l'ordre de grandeur du temps au bout duquel deux atomes adsorbés en des points quelconques de la surface du cristal se rencontreront.

b) À votre avis, par quel mécanisme pourront-ils alors évacuer l'énergie (4,5 eV) correspondant à l'énergie de liaison de la molécule d'hydrogène pour former cette molécule

?

Qu'arrivera-t-il ensuite à cette molécule ?