

MODELE DE BOHR DE L'ATOME D'HYDROGÈNE

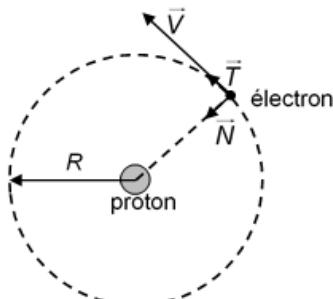
On se propose d'étudier le modèle de l'atome d'hydrogène proposé par Niels Bohr en 1913. Ce modèle est une continuité du modèle planétaire proposé par Ernest Rutherford, avec cette différence essentielle que Niels Bohr introduisit un nouveau concept, à savoir la **quantification des niveaux d'énergie** dans l'atome.

Données : $m = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$; $e = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$; $r = 5,3 \cdot 10^{-11} \text{ m}$; $k = 9,0 \cdot 10^9 \text{ N.m}^2/\text{C}^2$;
 $\hbar = 6,6 \cdot 10^{-34} \text{ J.s}$; $c = 3,0 \cdot 10^8 \text{ m.s}^{-1}$; $1 \text{ eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$.

Traitement par la mécanique classique

Document 1. Mouvement de l'électron dans l'atome.

Pour commencer cette étude, on suppose que l'électron est animé d'un mouvement circulaire et uniforme de rayon r autour du proton. Les caractéristiques du mouvement de l'électron sont exprimées dans la base mobile de vecteurs unitaires \vec{N} et \vec{T} comme indiqué sur le schéma qui ci-dessous. Dans cette base mobile les composantes de l'accélération s'expriment par : $\mathbf{a}_N = V^2 / r$ et $\mathbf{a}_T = dV / dt$.



L'électron est soumis de la part du proton à une force d'interaction électrostatique \vec{F} centripète :

$$\vec{F} = k \frac{e^2}{r^2} \vec{N}$$

où R est le rayon de l'atome, e la valeur de la charge électrique élémentaire et k une constante.

La vitesse de l'électron s'exprime alors sous la forme :

$$V = \sqrt{\frac{k e^2}{m r}}$$

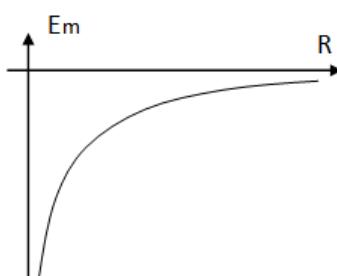
Pour $r = 5,3 \cdot 10^{-11} \text{ m}$ on montre que la vitesse de l'électron est : $V = 2,2 \times 10^6 \text{ m.s}^{-1}$

Document 2. Energie mécanique de l'électron dans l'atome d'hydrogène.

L'énergie mécanique est donnée par la relation : $E = E_c + E_{p(\text{électrique})}$ avec $E_{p(\text{électrique})} = -k \frac{e^2}{r}$

(avec $E_p = 0$ pour R infini).

On montre alors que $E = -\frac{1}{2} k \frac{e^2}{r}$ d'où le graphique ci-dessous :



On remarque immédiatement que dans ce modèle classique tous les rayons d'orbite sont possibles et donc toutes les valeurs d'énergie également.

Traitements selon la quantification de Bohr.

Or d'après la théorie de l'électromagnétisme de Maxwell (qu'on ne développera pas ici), un électron en orbite autour d'un noyau aurait dû rayonner en émettant de l'énergie lumineuse, parce qu'il possède une charge électrique. En perdant son énergie par rayonnement, il devait tomber sur le noyau. Pour résoudre cette impossibilité, Bohr proposa, dans son hypothèse, la quantification des orbites, c'est-à-dire qu'il devait y avoir certaines orbites sur lesquelles l'électron n'émet pas de rayonnement. Ce modèle avait aussi l'avantage d'expliquer que le spectre de l'hydrogène ne montrait que certaines raies et non un spectre continu. Pour chaque orbite, l'électron a une énergie quantifiée donnée par l'expression suivante :

$$E_n = \frac{-13,6}{n^2} \text{ (eV)}$$

où n est un nombre entier strictement positif appelé **nombre quantique principal**.

À chacune de ces énergies est associée une orbite circulaire de l'électron dont le rayon r_n vérifie :

$$r_n = a_0 n^2$$

avec a_0 , dit **rayon de Bohr**, la valeur du rayon de l'atome pour $n = 1$; $a_0 = 52,9 \text{ pm} \approx 5,3 \cdot 10^{-11} \text{ m}$.

La relation donnant E_n a été établie à partir des données spectrales d'émission de l'atome d'hydrogène, c'est-à-dire des énergies et longueurs d'onde des photons émis lors de la désexcitation de l'atome. Ainsi on peut vérifier que pour la **transition $3 \rightarrow 2$** (du niveau 3 au niveau 2) la longueur du photon est $\lambda = 658 \text{ nm}$.

Allons plus loin avec la dualité de De Broglie

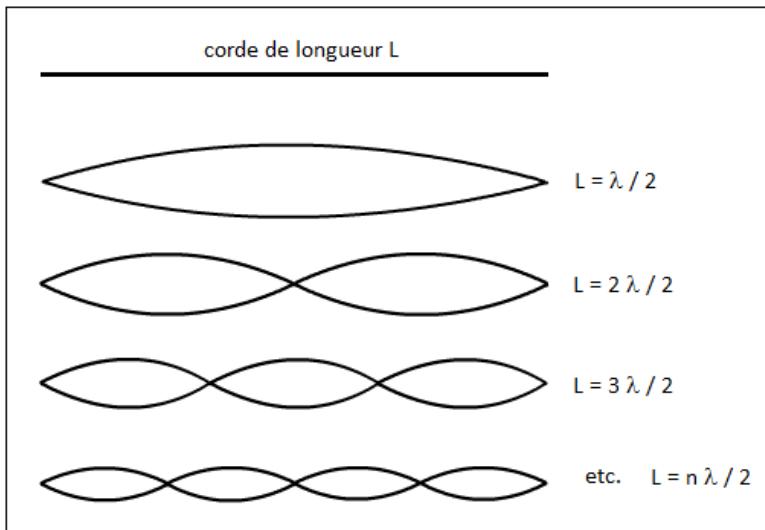
On sait que, selon le modèle du quanton (associant particule et onde), la longueur d'onde associée à l'électron s'exprime sous la forme :

$$\lambda = \frac{h}{mV}$$

(Remarque : Il ne faut pas confondre bien sûr cette longueur d'onde associée à l'électron avec la longueur d'onde du photon émis au cours d'une désexcitation électronique de l'atome).

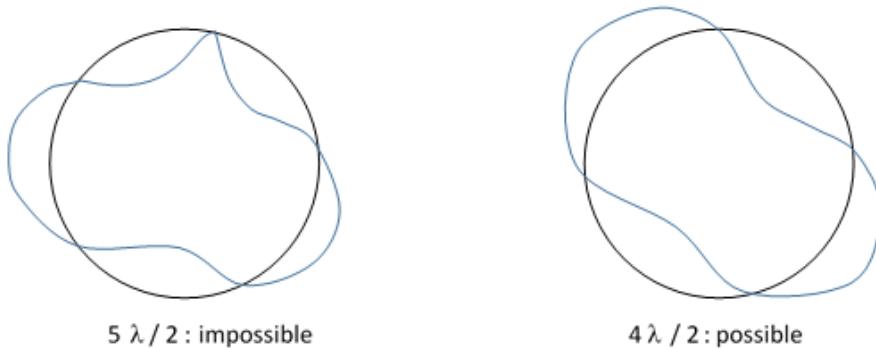
La démonstration qui va suivre consiste à introduire l'idée de quantification dans le traitement par la mécanique classique. Bien que cette étude soit très sommaire et très éloignée des développements mathématiques de la mécanique quantique, elle donne tout de même des résultats étonnamment satisfaisants. Elle permet peut-être aussi de mieux saisir les idées de base de la mécanique quantique.

On partira d'une analogie. Il existe en effet, dans le domaine de la physique des ondes, un système bien connu dont les états sont quantifiés : la corde de guitare ! En effet ses modes de vibration ne peuvent correspondre qu'à certains états dits stationnaires. C'est par ailleurs ce qui fait que la corde produit un son de hauteur donné, avec ses harmoniques. Ceci se traduit par la relation : $L = n \lambda / 2$ comme le montrent les schémas ci-dessous.



Chaque état correspond donc à un **nombre entier n**, dit **nombre quantique**.

Nous allons traiter l'orbite de l'électron dans l'atome d'hydrogène de la même façon que la corde de guitare : l'onde associée à l'électron sur cette orbite doit être dans un état stationnaire. Donc le périmètre de l'orbite (circulaire selon la mécanique classique) doit correspondre à un **nombre entier de longueur d'onde**. C'est un peu différent de la corde parce que l'orbite est fermée et donc la situation correspondant à un nombre impair de demi-longueur d'onde est impossible :



On obtient donc la relation : $\text{périmètre} = 2\pi r = n \lambda = n \frac{h}{mV}$

Or on connaît l'expression classique de la vitesse de l'électron $V = \sqrt{\frac{k\epsilon^2}{mr}}$ ainsi que l'expression classique de l'énergie, $E = -\frac{1}{2}k\frac{\epsilon^2}{r}$.

Quelques lignes de calculs vont nous donner l'expression quantifiée du rayon d'orbite et par conséquent l'expression quantifiée de l'énergie :

$$r = \frac{n^2 h^2}{4\pi^2 m k \epsilon^2} \quad \text{et} \quad E = -\frac{2\pi^2 m k^2 \epsilon^4}{n^2 h^2}$$

Et si on procède aux calculs numériques avec les valeurs connues des constantes impliquées on obtient : $r = 5,3 \cdot 10^{-11} \times n^2$ et donc on retrouve bien l'expression $r_n = a_0 n^2$

D'autre part on obtient : $E = -21,67 \cdot 10^{-19} / n^2$ (en joule) = $-13,6 / n^2$ (en eV). On retrouve bien :

$$E_n = \frac{-13,6}{n^2} \text{ (eV)}.$$

La mécanique quantique.

L'étude précédente n'est bien sûr qu'une approche. Le formalisme de la mécanique quantique est beaucoup plus élaboré et permet de rendre compte des structures atomiques et moléculaires, avec des résultats qui sont en accord avec l'expérience.

On pourra pour s'en convaincre feuilleter le cours de l'Ecole Polytechnique de MM. Jean-Louis Basdevant et Jean Dalibard (2002). https://www.phys.ens.fr/~dalibard/Notes_de_cours/X_MQ_2003.pdf