Le modèle de Bohr, une introduction à la mécanique quantique.

Ce polycopié est donné à titre culturel. Signalons néanmoins que es notions exposées sont évoquées, en commentaire, dans le programme de sup PCSI.

Le chapitre de mécanique du point matériel est l'occasion de signaler une limite de validité de la mécanique newtonienne, en relation avec le cours de chimie. Historiquement, le modèle proposé par Niels Bohr (1885-1962) a consisté à intégrer la théorie quantique initiée par Planck dans le modèle planétaire de l'atome introduit par Rutherford.

<u>Théorie classique :</u>

Le modèle planétaire de l'atome d'hydrogène consiste en une représentation de l'atome selon laquelle l'électron, de charge –e, gravite selon une trajectoire circulaire de rayon a autour du proton de charge +e.

Le rapport de masse considérable entre le proton et l'électron (m_p / m = 1836) permet de considérer le proton comme immobile dans le référentiel d'étude, supposé galiléen.

La seule interaction à prendre en compte est la force coulombienne s'exerçant entre les deux charges :

$$\vec{F} = \frac{-e^2}{4\pi\varepsilon_o a^2}\vec{e_r}$$

L'écriture du T.M.C. en O, position du proton conduit à un moment cinétique invariant, car le moment des forces est nul en O. Son module s'écrit : L = mav. On en conclut que l'électron tourne selon un mouvement circulaire et uniforme.

La R.F.D. va permettre de déterminer la vitesse v : $m\vec{\gamma} = -m\frac{v^2}{a}\vec{e_r} = \frac{-e^2}{4\pi\varepsilon_o a^2}\vec{e_r}$

amène après projection et simplification à : $v = \left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_o am}\right)^{1/2}$

L'énergie mécanique correspond alors à la somme des énergies cinétique et potentielle de l'électron :

$E = E_c + E_p$ soit : $\frac{1}{2}mv^2 + \frac{-e.e}{4\pi\varepsilon_o a} = \frac{e^2}{8\pi\varepsilon_o a} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_o a}$

finalement : $E = -\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_o a}$

Remarquons que dans ce modèle, le rayon a de l'atome peut prendre à priori toutes valeurs, de même que l'énergie E ou le moment cinétique L.

<u>Remise en cause :</u>

La théorie de l'électromagnétisme montre qu'une charge subissant une accélération (ce qui est le cas pour l'électron dans son mouvement) va rayonner un champ électromagnétisme avec une puissance moyenne proportionnelle à la moyenne du carré de l'accélération, répondant ici à : $\langle P\rangle = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_o}\frac{\omega^4 a^2}{3c^3}$ où ω est la pulsation du mouvement (ω = v / a) et c la vitesse de la lumière dans le vide.

Sur une durée dt, ceci correspond à une énergie dissipée par rayonnement qui sera prise à l'énergie du système : dE = $-\langle P\rangle dt$; expression valide en supposant que la durée dt est grande devant la période T du mouvement (durée d'une révolution), de façon à prendre en compte la valeur moyenne de la puissance rayonnée.

Le rapport τ = |E| / $\langle P\rangle$ a la dimension d'un temps : $\tau = \frac{3c^3}{2\omega^4 a^3}$ ou en remarquant que

$$E = -\frac{1}{2}mv^2 = -\frac{1}{2}ma^2\omega^2 : \quad \tau = \frac{4\pi\varepsilon_o}{e^2}\frac{3mc^3}{2\omega^2}$$

L'intégration de dE = -(E/τ)dt conduit à : $E = E_o \exp\left(\frac{-t}{\tau}\right)$.

L'énergie du système va donc décroître exponentiellement avec une durée caractéristique τ.

Numériquement, on aurait pour valeurs typiques une longueur d'onde d'émission $\lambda = 0{,}50\ \mu m$ correspondant à une pulsation $\omega = 2\pi c/\lambda = 3{,}8.10^{15}$ rad/s. $e = 1{,}6.10^{-19}$ C et $m = 9.1.10^{-31}$ kg mènent alors à $\tau = 1{,}4.10^{-9}$ s.
Ce résultat valide l'hypothèse $T << dt$: il existe une durée dt infinitésimale devant τ, et très grande devant la période $T = \lambda / c = 1{,}7.10^{-15}$ s.

L'énergie va décroître à un rythme fixé par la constante de temps τ, et en remarquant que le rayon a doit évoluer dans le même sens, l'édifice atomique va donc s'écrouler en quelques millliardièmes de seconde.
Ce scénario étant manifestement très éloigné de la réalité, le modèle planétaire est à remettre en cause.

<u>Modèle quantique :</u>

Les premiers travaux de Planck ayant introduit l'idée d'une ***quantification de l'énergie***, Niels Bohr propose d'appliquer cette idée au modèle de l'atome : l'énergie de l'atome est supposée quantifiée. Seule certaines valeurs discrètes E_n sont permises pour l'énergie E, décrite par la suite numérique : $\boldsymbol{E_n = E_o.(1/n^2)}$

où E_o est l'énergie de l'atome au niveau fondamental, et n est un nombre entier positif, dit nombre quantique fondamental.

Des observations expérimentales valident cette affirmation : l'observation de spectres d'émission de l'atome d'hydrogène montre un spectre discontinu, les longueurs d'onde d'émission mesurées devant respecter la relation : $\Delta E = \dfrac{hc}{\lambda}$ où ΔE est la variation d'énergie correspondant à la transition entre deux niveaux

$\Delta E = E_o\left(\dfrac{1}{n_f^{\ 2}} - \dfrac{1}{n_i^{\ 2}}\right)$ et h est la constante de Planck : $h = 6{,}62.10^{-34}$ J.s.

Ces observations permettent d'accéder expérimentalement à : $E_o = -13{,}6$ eV (1 eV $= 1{,}6.10^{-19}$ J).

La relation : $E = -\dfrac{e^2}{8\pi\varepsilon_o a}$ amène à conclure à une ***quantification du rayon a*** selon une série de valeurs discrètes a_n avec $a_n = -\dfrac{n^2e^2}{8\pi\varepsilon_o E_o}$. Le rayon correspondant au niveau fondamental est dit rayon de Bohr et vaut : $a_o = 0{,}53$ nm.
L'expression du moment cinétique L = mav conduit, là encore, à une ***quantification du moment cinétique***.
On obtient après calculs : $L_n = n.L_o$ avec $L_o = \left(\dfrac{me^2}{4\pi\varepsilon_o}a_o\right)^{1/2}$ soit $L_o = 1{,}1.10^{-34}$ kg.m²s^{-1} .

Ce modèle a un intérêt historique et pédagogique, mais a lui même été largement remis en cause depuis. En particulier, la représentation planétaire de l'atome, et la notion même d'une trajectoire précise pour les électrons ont dus être abandonnées.

Les travaux de Heisenberg et de Schrödinger ont conduit à la description d'une probabilité de présence de l'électron dans l'espace, décrite par une fonction d'onde $\psi(r,\theta,\varphi)$, quantifiée par plusieurs nombre quantiques.

Remarques :
1- Ces notions sont en partie reprisent dans un exercice de la feuille « Théorème du Moment Cinétique ».
2- Ces résultats peuvent se transposer au cas des ions hydrogénoïdes, pour lesquels le noyau comporte Z protons, et qui ne portent qu'un seul électron : il suffit de remplacer $e^2/4\pi\varepsilon_o$ par $Z.e^2/4\pi\varepsilon_o$ dans les expressions.