

## 1. La « catastrophe ultraviolette » : rupture avec la Physique classique

➔ Voir TD-cours 1

## 2. Modèle de Bohr de l'atome d'hydrogène

Le concept de *quantum d'énergie*  $E_0 = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$  s'avèrera utile pour expliquer par exemple *l'effet photoélectrique* (voir a.), ce qui mènera à des modèles de plus en plus développés pour expliquer les comportements de systèmes d'ordres de grandeur de l'atome/molécule et ordres de grandeur inférieurs. On parlera, à ces échelles d'apparition d'*effets quantiques*.

### a. Effet photoélectrique

Il est possible d'« arracher » des électrons à un échantillon métallique grâce à un rayonnement électromagnétique, de longueur d'onde  $\lambda$  / de fréquence  $\nu$  (fig. 2.1). Cependant, dès la fin du 19<sup>e</sup> siècle, Hertz constate que ces « photoélectrons » ne sont produits qu'à partir d'une certaine fréquence, un certain *seuil*. De plus, l'énergie cinétique des électrons émis semble proportionnelle à la fréquence du rayonnement incident.

C'est Einstein, en 1905, qui propose d'expliquer l'effet photoélectrique en se basant sur les quanta.

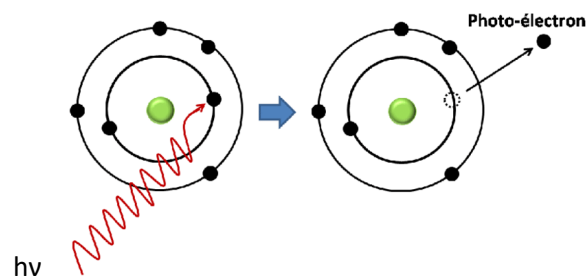


Fig. 2.1 : Effet photoélectrique expliqué par les quanta

Einstein propose que l'énergie  $h\nu$  apportée par un photon incident de fréquence  $\nu$  sert pour partie à arracher un électron (on parlera d'ionisation d'un atome), et que l'excédent communique à cet électron une énergie cinétique avec laquelle il est émis. Dans la relation ci-dessous, lors de l'ionisation,  $E_i$  représente l'énergie d'ionisation, et  $E_c$  l'énergie cinétique. Tous ces termes sont positifs.

$$h\nu = E_i + E_c$$

L'on explique donc de la manière suivante l'absence d'effet photoélectrique sous un certain seuil de fréquence : si l'énergie  $h\nu$  du photon incident est inférieure au seuil  $E_i$ , l'ionisation ne peut avoir lieu. Il faut augmenter la fréquence  $\nu$  (diminuer la longueur d'onde  $\lambda$ ) jusqu'à au moins  $E_i$ . Des expériences menées par Millikan vers 1916 corroborent la proposition d'Einstein, qui consistent à récolter sur des plaques métalliques des faisceaux de photoélectrons produits à partir d'un métal bombardé par un rayonnement électromagnétique.

Comment cependant expliquer cette énergie seuil  $E_i$  nécessaire à dépasser pour ioniser un atome ? C'est le modèle de Bohr qui en 1913 propose une explication. Il apporte également une explication à des constats antérieurs, en *spectroscopie*, notamment celui que certains spectres de rayonnement, comme ceux des lampes à vapeurs (He, Ne, Ar, Na, Hg...) sont composés uniquement de raies à des longueurs d'onde bien précises.

## b. Modèle de Bohr

En 1913, Bohr propose un modèle pour décrire l'atome d'hydrogène, c'est-à-dire le plus simple des atomes : un proton pour noyau, et donc un seul électron. A noter que le neutron ne sera mis en évidence qu'en 1932 !

Au-delà de l'atome d'hydrogène et des *hydrogénoïdes*, le modèle de Bohr est inapplicable en raison de la présence de plusieurs électrons. En effet, la mécanique quantique à proprement parler n'existe pas encore en tant que discipline, et Bohr pose comme base de son modèle trois hypothèses qui font encore appel à des concepts de physique classique.

1<sup>ère</sup> hypothèse : Le modèle de l'atome est alors le *modèle planétaire* de Rutherford (1911), où l'on considère que les électrons sont présents sur des *orbites* et *gravitent* autour du noyau. Bohr postule que l'électron gravite sur des orbites circulaires stables successives, sans rayonner d'énergie car autrement il s'« effondrerait » sur le noyau.

2<sup>e</sup> hypothèse : L'électron ne change d'orbite qu'en absorbant ou en rayonnant une certaine quantité d'énergie. Cette hypothèse provient des observations de la spectroscopie dans les décennies précédentes (Lyman, Balmer, Paschen...) et de la formule proposée par Rydberg.

3<sup>e</sup> hypothèse (découle de la 1<sup>ère</sup>) : Le moment cinétique de l'électron sur une orbite est constant. Dans ce cours, nous dirons simplement que pour que l'orbite soit stable, elle doit vérifier :

$$mrv = n \frac{h}{2\pi} = n\hbar$$

où  $m$  est la masse de l'électron,  $v$  est sa vitesse,  $r$  le rayon de l'orbite circulaire,  $h$  la constante de Planck. On pourra noter  $\hbar = \frac{h}{2\pi}$  la constante de Planck réduite. Quant à  $n$ , il représente le numéro de la couche électronique, c'est-à-dire de l'orbite concernée.

Les résultats de ce modèle (→ Voir TD2) sont notamment :

**Rayons des orbitales successives :**  $r_n = a_0 n^2 ; n = 1, 2, 3 \dots$   $a_0$  étant le « rayon de Bohr », le plus petit rayon possible, celui de la première orbitale, dite « fondamentale ».

**Energie de l'électron sur l'orbitale  $n$  :**  $E_n = \frac{E_1}{n^2} ; n = 1, 2, 3 \dots$   $E_1$  étant l'énergie du niveau fondamental.

On dira que l'énergie de l'électron est *quantifiée*, elle ne peut prendre que certaines valeurs. Mais également que le rayon des orbitales successives est quantifié.

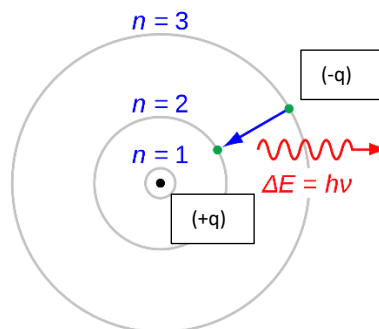


Fig. 2.2 : Quantification des niveaux d'énergie / orbites dans l'atome d'hydrogène.

On remarque que les énergies des orbitales sont négatives, le niveau d'énergie nulle étant par convention celui où l'atome est ionisé, c'est-à-dire où l'électron n'est plus lié au noyau ( $n \rightarrow +\infty$ ).

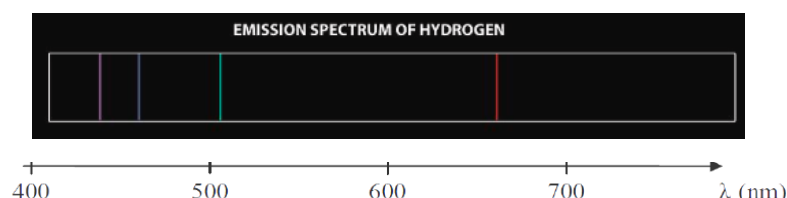
On peut ainsi expliquer les phénomènes cités plus haut :

\*L'énergie d'ionisation  $E_i$  correspond en fait à la différence entre les énergies de l'état ionisé et de l'état fondamental  $E_i = E_{final} - E_{initial} = 0 - E_1 = -E_1$ .

\*L'électron peut passer d'une orbite  $n$  à une orbite  $m$  en absorbant de l'énergie (excitation) ou en cédant de l'énergie (désexcitation), c'est-à-dire en absorbant un quanta d'énergie provenant d'un photon, ou en émettant un photon. Cette énergie  $\Delta E_{n \rightarrow m} = E_{final} - E_{initial} = E_m - E_n$  correspond au net entre les deux niveaux concernés, et est liée à la longueur d'onde du photon par la relation...

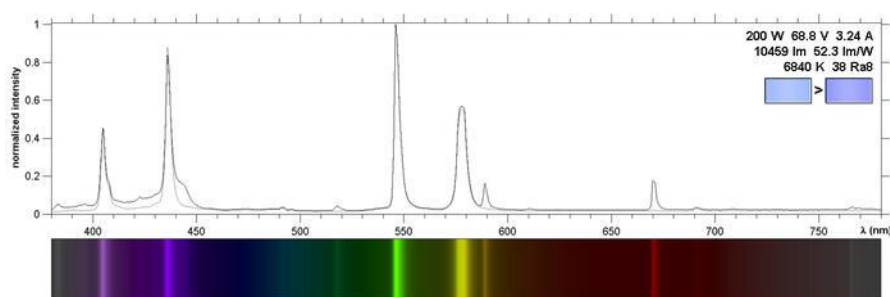
$$\Delta E = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$$

\*Les raies observées sur le spectre de l'hydrogène correspondent aux longueurs d'onde émises par les transitions autorisées par le diagramme d'énergie de l'espèce concernée. Les raies d'émission observées correspondent à la série de Balmer (transitions de désexcitation où  $n_{final} = 2$ ).



**Fig. 2.3 : Spectre de raies d'émission de l'hydrogène**

\*Bien que le modèle de Bohr concerne l'hydrogène, on peut extrapoler et interpréter ainsi le rayonnement (de désexcitation) des lampes à gaz. Ainsi, une lampe à vapeurs de Mercure émettra une lumière qui apparaîtra verte, en raison de son spectre d'émission (fig.2.4).



**Fig. 2.4 : Spectre de raies d'émission d'une lampe à vapeurs de Mercure (Hg)**

Les expériences de Franck et Hertz en 1914 vont dans le sens du modèle de Bohr, qui sera après 1925 dépassé par la Physique Quantique. En effet, le modèle de Bohr repose encore beaucoup sur des hypothèses classiques, et son étendue s'arrête aux hydrogénoïdes.

Il a néanmoins le mérite de mettre en évidence des phénomènes liés à la quantification de l'énergie, qui s'avère peu à peu être une réalité.

### c. Relation de De Broglie

Voulant donner des fondations théoriques plus solides à l'idée de *quantification*, De Broglie propose en 1924 que chaque particule possède une longueur d'onde associée. Cela se traduit par la

relation  $\lambda = \frac{h}{p}$ , où  $p$  est la quantité de mouvement, qui pour une particule massique animée d'une vitesse  $v$  vaut  $p = mv$ . Cette hypothèse sera appuyée en 1927 par l'expérience de Davisson et Germer, qui parviennent à réaliser la diffraction avec non plus de la lumière comme Young en 1801, mais bien avec un faisceau d'électrons, mettant en avant la *dualité onde-corpuscule* des électrons.

De Broglie retrouve également les résultats de Bohr sur l'atome d'hydrogène en considérant que les orbites stables sont celles de périmètre multiple de la longueur d'onde de l'électron ( $L = n\lambda$ ), s'affranchissant ainsi du moment cinétique.

#### d. Principe d'incertitude d'Heisenberg

A partir de l'hypothèse de De Broglie, la Mécanique Quantique va prendre son essor, dès 1925. En particulier, elle mène à la notion de « fonction d'onde » d'une particule (voir partie 3.) qui permet à Schrödinger de formuler l'équation différentielle que vérifie la fonction d'onde.

Parmi les résultats de la Physique Quantique, on peut aussi citer le principe d'incertitude d'Heisenberg : pour une particule, le produit des incertitudes sur la position et sur la quantité de mouvement est toujours supérieur à  $\frac{\hbar}{2}$ .

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

On rappelle d'autre part que la quantité de mouvement  $p$  est liée à la masse et à la vitesse par la relation  $p = mv$ . De plus, les corps étudiés dans le cadre de ce chapitre sont de masse constante. On a donc :  $\Delta p = \Delta(mv) = m\Delta v$ , d'où dans ce cas :  $m \cdot \Delta x \Delta v \geq \frac{\hbar}{2}$ .

