

**Exercice 3-5 : Système d'unités de Hartree**

a) Imposer les valeurs de deux grandeurs mécaniques est toujours possible puisque l'on dispose de trois grandeurs fondamentales (mètre, kilogramme, seconde). La dernière condition est aussi réalisable puisqu'elle revient à modifier la quatrième grandeur fondamentale (Ampère) du Système International.

b) La méthode à suivre est identique à celle mise en oeuvre à la question 3-3(b). Pour mettre en équation le modèle de Bohr, on écrit que la force d'attraction électrostatique est égale à  $m_e$  fois la composante radiale de l'accélération :

$$\frac{e^2}{r^2} = \frac{m_e v^2}{r}.$$

On a posé

$$e^2 \equiv \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0} = 1,5188 \cdot 10^{-14} \text{ SI.}$$

D'autre part, le mouvement est à accélération centrale, il est donc plan et la composante du moment cinétique normale à ce plan est constante ; pour un mouvement circulaire uniforme, elle vaut  $m_e v r$ . Dans le modèle de Bohr, cette quantité est quantifiée et vaut  $\hbar$  pour l'état de plus faible énergie.

On tire immédiatement  $v = e^2/\hbar = 2,26 \cdot 10^6 \text{ m/s}$ . Le rayon de l'orbite est donné par

$$r = e^2/m_e v^2 = \hbar^2/m_e e^2 \equiv a_0 = 52,9 \text{ pm.}$$

L'énergie potentielle est  $E_p = -e^2/r = -m_e e^4/\hbar^2$ . L'énergie cinétique s'écrit  $E_c = \frac{1}{2} m_e v^2 = m_e e^4/2\hbar^2$ . De ces deux expressions, on déduit la valeur de l'énergie totale de l'électron :  $E_t = E_p + E_c = -m_e e^4/2\hbar^2$  qui vaut, en electron-volt,  $-13,6 \text{ eV}$ .

Le temps mis par l'électron à parcourir la distance  $r$  est  $t = r/v = \hbar^3/m_e e^4 = 2,341 \cdot 10^{-17} \text{ s}$ .

c) Si on impose  $\hbar = m_e = e = 1$ , on voit que  $r, v, t, E_p$  sont tous égaux à l'unité : ce sont les unités du système de Hartree. L'unité de longueur est  $r = 52,9 \text{ pm}$ , l'unité de temps vaut  $0,02341 \text{ femtoseconde}$ .