Introduction à la théorie de BOHR

Si l'électron émet de l'énergie sous forme de rayonnement électromagnétique, il perd donc de l'énergie cinétique (vitesse) et finira donc nécessairement un jour ou l'autre (sauf intervention extérieure) par tomber sur le noyau (illustration du phénomène dans la figure ci-dessous). Or la matière nous environnant est stable.

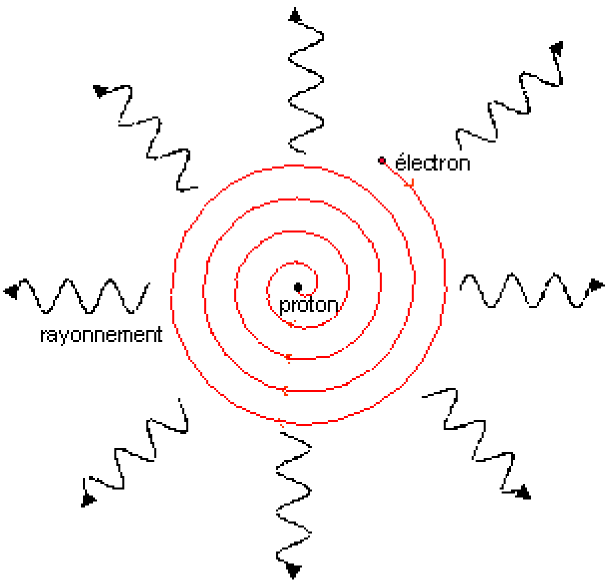


Figure: 41.4 - Illustration simpliste du bremstrahlung

Modèle inexact → Apparition du modèle de Bohr

ATOME DE BOHR

Le modèle de Bohr repose sur la théorie quantique de Planck selon laquelle l'échange d'énergie entre le rayonnement et la matière ne s'effectue que par quantité finie ou par quantum (paquet) d'énergie égal à $h\nu$.

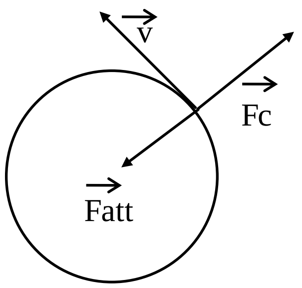
$$\mathbf{E = h\nu} \text{ ----------(1)}$$

où E : énergie en joule.
h : constante de Planck
$= 6.62\ 10^{-34}$ J.s.
ν = fréquence s^{-1}.

Bohr a donné plusieurs postulats:

1- L'électron de l'atome d'hydrogène ne gravite autour du noyau que sur certaines orbites privilégiées (orbites stationnaires) qui forment une suite discontinue, à chacune de ces orbites correspond une énergie E.

2- Durant son mouvement autour du noyau, l'électron ne rayonne pas, son énergie ne varie pas et son mouvement ne s'amortit pas. Sur chaque orbite privilégiée, l'équilibre dynamique de l'électron obéit aux lois de la mécanique classique.



$$|\vec{Fatt}| = |\vec{Fc}|$$

Force d'attraction coulombienne = Force centrifuge.

3- Lorsque l'électron passe d'une orbite n_1 à une orbite n_2, il absorbe ou émet une quantité d'énergie rayonnante ΔE.

$$\mathbf{\Delta E = h\nu = |E\, n_2 - E\, n_1|} \text{ ----------(2)}$$

Remarque: le passage se fait par saut brusque.

4- Les seules orbites possibles sont telles que le produit de la quantité de mouvement (mv) par le rayon (r) de l'orbite soit un multiple entier de la constante de Planck h.

$$\mathbf{mvr = nh / 2\Pi} \text{ ----------(3)}$$

où : n = nombre entier $\in$ N*.

CALCUL DU RAYON DE BOHR

Condition de stabilité : $\Sigma\vec{F} = \vec{0} \Rightarrow \vec{F}att + \vec{F}c = \vec{0}$ (*)

Fatt = Kqq' / R^2 = - Ke^2 / r^2; Fc = mv^2 / r.

(*) $\Rightarrow$ (mv^2 / r) - (Ke^2 / r^2) = 0 $\Rightarrow$

$$\mathbf{mv^2 = Ke^2 / r} \text{ -----------(4)}$$

où: K = constante de Coulomb = 9 10^9 Nm^2 C $^{-2}$.

Du quatrième postulat : v = nh / 2Πmr (**)

Injectons (4) dans (**), on aura : m (n^2 h^2 / 4Π^2 m^2 r^2) = Ke^2 /r $\Rightarrow$

$$\mathbf{r = (h^2 / 4\Pi^2 Ke^2 m)\ \ n^2} \text{ ----------(5)}$$

Pour l'hydrogène dans son état fondamental : n = 1 avec h = 6.62 10^{-34} J.s
K = 9 10^9 Nm^2 C $^{-2}$
m_e = 9.1 10^{-31} Kg
e = 1.6 10^{-19} C.

On aura : $r_{hydrogène}$ = 0.53 10^{-10} m = 0.53 A° = rayon de Bohr = r_0.

d'où :

$$\mathbf{r_n = r_0\, n^2} \text{ ----------(5')}$$

Calcul de l'énergie

Conservation d'énergie : $E = Ep + Ec$

$Ec = ½ mv^2$; $Ep = (-Ke^2 / r^2)\ r = -Ke^2 / r.$

$Ep + Ec = 1/2 (Ke^2 / r) + (-Ke^2 / r)$; $[mv^2 = Ke^2 / r] \Rightarrow$

$$\mathbf{E = -Ke^2 / 2r} \text{ ----------(6)}$$

De (6) : $E = -Ke^2 / 2r$ et de (5) : $r = (h^2 / 4\Pi^2 Ke^2 m)\ n^2$, on obtient :

$$\mathbf{E = (- 2\Pi^2 K^2 e^4 m / h^2)\ 1 / n^2} \text{ ----------(7)}$$

$$\Downarrow$$

(quantification de l'énergie)

Pour l'hydrogène dans son état fondamental : n = 1

$(7) \Rightarrow E_{hydrogène} = -13.54 \approx -13.6$ e.V.

d'où : $\mathbf{E_n = E_1 / n^2}$ ----------(7') où : $E_1 = -13.6$ e.V.

Formule de Balmer

Du troisième postulat : $\Delta E = |En_2 - En_1| = h\nu = h\,C / \lambda = h\,C\,\bar{\nu}$

où : λ = longueur d'onde
$\bar{\nu}$ = nombre d'onde = inverse de λ
ν = fréquence.

Si $n_2 > n_1$: $\Delta E = h\,C\bar{\nu} = 2\Pi^2 K^2 e^4 m / h^2 \;(1 / n_1^2 - 1 / n_2^2)$

$\Rightarrow \bar{\nu} = 2\Pi^2 K^2 e^4 m / h^3 C \;(1 / n_1^2 - 1 / n_2^2)$

$\Rightarrow \bar{\nu} = \mathbf{R_H\,(1 / n_1^2 - 1 / n_2^2)}$ -------(8) Formule de Balmer

où : $R_H = 2\Pi^2 K^2 e^4 m / h^3 C = 1.1\ 10^5\ cm^{-1} = 2.2\ 10^{-18}\ J = 13.75\ e.V$ =
constante de Rhydberg.

Remarques :

1) n_1 représente une série de raies.

Si $n_1 = 1$ $\Rightarrow$ série de Lyman $\Rightarrow$ ultrat violet (U.V).
Si $n_1 = 2$ $\Rightarrow$ série de Balmer $\Rightarrow$ visible.
Si $n_1 = 3$ $\Rightarrow$ série de Paschen $\Rightarrow$ Infra-rouge (I.R).
Si $n_1 = 4$ $\Rightarrow$ série de Brackett $\Rightarrow$ Proche infra-rouge .

n_2 représente une raie dans une série $n_2 > n_1$.

Chaque raie est caractérisée par sa fréquence ν ou son nombre d'onde $\bar{\nu}$ qu'il est possible de mesurer.

Série	n_1	n_2	région du spectre	longueur d'onde en A°
Lyman	1	2, 3, 4, ...	U.V	$1215.7 \geq \lambda \geq 972.5$
Balmer	2	3, 4, 5, ...	visible	$6563 \geq \lambda \geq 4341$
Paschen	3	4, 5, 6, ...	I.R	$18750 \geq \lambda \geq 10940$
Brackett	4	5, 6, 7, ...	proche I.R	$40500 \geq \lambda \geq 26300$

2) Si $n_2 = \infty$ on parlera de raie limite et $E_\infty = 0$.
on définit alors, l'énergie d'ionisation Ei comme étant l'énergie qu'il faut fournir à l'atome pour extraire un électron (envoyer l'électron à l'infini).
Ex : $E_i = E_\infty - E_1 = 0 - (-13.54) = +13.54$ e.V pour l'atome d'hydrogène.

Généralisation

La théorie de Bohr est applicable à l'hydrogène et aux ions hydrogènoïdes.

Un **hydrogènoïde** est un ion dont le noyau contient Z protons et ne possède qu'un seul électron comme l'atome d'hydrogène.

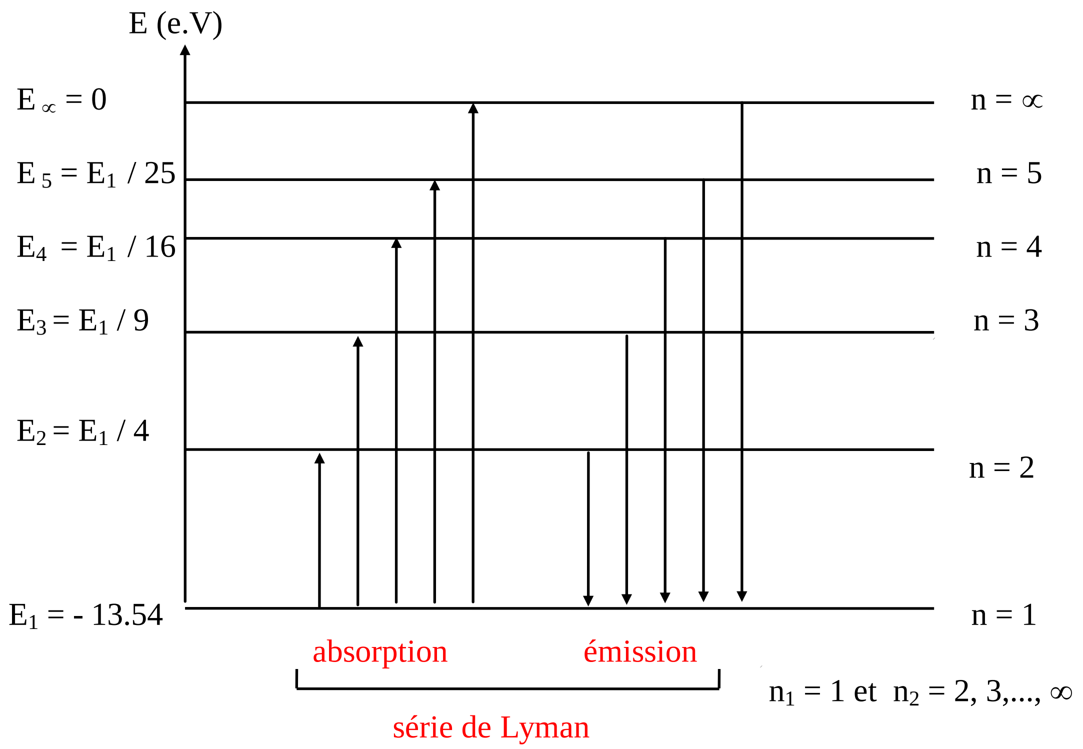
$$E_n = Z^2 E_1 / n^2 \quad \text{avec} \quad E_1 = -13.54 \text{ e.V}$$

$$r_n = r_0 n^2 / Z \quad \text{avec} \quad r_0 = 0.53 \text{ A°}$$

$$\bar{\nu} = R_H Z^2 (1/n_1^2 - 1/n_2^2) \quad \text{avec} \quad n_2 > n_1$$

Diagramme énergétique

(exemple de diagramme)



Remarques :

- On dira transition (flèche à double tête); lorsqu'on ne distingue pas entre émission ou absorption.
- Les raies d'une série se resserrent de plus en plus près d'une raie limite au delà de laquelle le spectre est continu car l'énergie n'est pas quantifiée.

Conclusion :

La théorie de Bohr eût le mérite d'expliquer le spectre de l'atome d'hydrogène et des ions hydrogènoïdes grâce à la notion de la quantification; tout en gardant les lois de la mécanique classique. Mais elle s'est trouvée incapable d'expliquer les spectres des atomes plus lourds.

En réalité, les électrons ne décrivent pas une trajectoire circulaire, on parle plutôt de probabilité d'existence des électrons dans un certain domaine.