ATOME DE BOHR

Les premiers modèles proposés pour la distribution des électrons autour du noyau sont inspirés du système solaire.

BOHR a posé des postulats :

1) L'électron tourne autour du noyau selon des orbites circulaires, appliquons les lois de la physique classique :

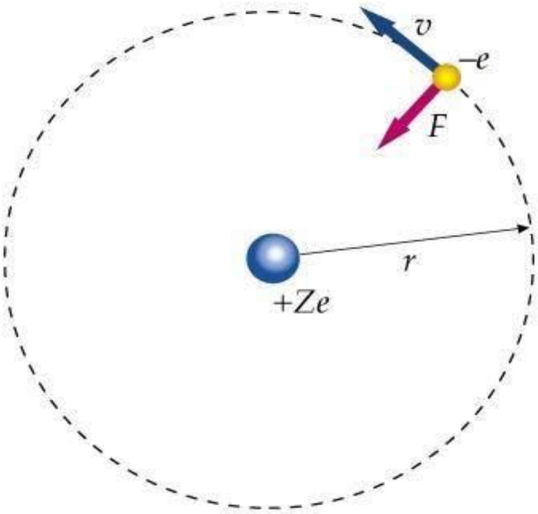
La force centrifuge mv^2/r

la force centripète : $-Ke^2/r^2$

à l'équilibre la somme des forces est égale à zéro.

$mv^2/r + (-Ke^2/r^2) = 0$ $\qquad$ $mv^2/r = Ke^2/r^2$

On peut généraliser et appliquer sur l'Hydrogénoïde.



$$F = \frac{kZe^2}{r^2} = \frac{mv^2}{r}$$

Hydrogénoïde : est un ion monoatomique - un cation - ne possédant atome d'hydrogène qu'un seul électron. Il a alors une structure semblable à celle de l'hydrogène, hormis la charge de son noyau *Ze* où *Z* est le numéro atomique de l'élément chimique et *e* la charge élémentaire. C'est donc un atome auquel on a arraché tous les électrons sauf un. Un Hydrogénoïde est de la forme $Z\,X^{+(Z-1)}$

mv2 = KZe2/r

On peut calculer l'énergie totale de l'électron sur l'orbite :

$E_T = E_c + E_P$ $\qquad$ $E_c = mv2/2$ $\qquad$ $E_p = -\,KZe2/r$

$E_T = KZe^2/2r - Kze^2/r$ $\qquad$ $E_T = -\,KZe^2/2r$

Selon cette relation toutes les valeurs de l'énergie sont possibles r = 0 (E=∞), r = ∞ (E = 0) ce qui est en contradiction avec les observations précédentes. Pour pallier cette contradiction, BOHR a posé un nouveau postulat.

2) Quand un mobile de masse m fait un mouvement périodique, le travail de la quantité de mouvement est obligatoirement égal à multiple de la constante de Planck.

$mv.(2\pi r) = nh$ $\qquad$ $mvr = nh/2\pi$ $\quad$ n = 1, 2, 3, 4…….

Ce principe fait rentrer des restrictions quantiques car les orbites permises sont qui vérifie la relation précédente.

$V = nh/2\pi mr$ $\qquad$ $v^2 = n^2.h^2 /4\pi^2m^2r^2$

Remplaçons v^2 dans m. $v^2/r = KZe^2/r^2$ $\qquad$ $r = n^2h^2/4\pi^2ZKme^2$

$K= 9.10^9$ N.m $\quad$ $m=9{,}1.10^{-31}$ Kg $\quad$ $e=1{,}6.10^{-19}$ c $\quad$ $h= 6{,}62.10^{-34}$ j.s $r = 0{,}53\ n^2/Z$ (A°)

Selon cette relation, le rayon des orbites permis pour l'électron dans l'atome d'hydrogène ou dans les Hydrogénoïde est exprimé par le nombre quantique n.

On remplace la valeur de r dans la relation $E = -KZe^2/2r$.

$E = -2\pi^2Z^2K^2me^4 /n^2h^2$ $\qquad$ $E = -13{,}6\ Z^2 /n^2$ ev

ΔE : c'est l'énergie nécessaire pour que l'électron fait un saut elle est égale à la différence entre l'état final et l'état initial.

$\Delta E = E_2 - E_1$ $\qquad$ $\Delta E = 2\pi^2Z^2K^2me^4.\ (1/n_1^2 - 1/n_2^2) /h^2$

$\Delta E = h\nu$ $\qquad$ $\bar{\nu} = \nu/c$ $\qquad$ $\Delta E = h.c.\bar{\nu}$ $\qquad$ $\bar{\nu} = \Delta E/h.c$

$$\bar{V} = 2\pi^2 Z^2 K^2 m e^4 . (1/n_1^2 - 1/n_2^2) / h^3 c$$

On compare cette relation avec celle de Rydberg.

$\bar{V} = R_{H.}(1/n_1^2 - 1/n_2^2)$ $R_H = 2\pi^2 Z^2 K^2 m e^4 / h^3 c$

$K = 9.10^9$ $N.m^2.c^{-2}$ $m = 9{,}1.10^{-31}$ Kg $e = 1{,}6.10^{-19}$ c

$C = 3.10^8$ m/s $h = 6{,}62.10^{-34}$ j.s

$R_H = 2{,}21.10^{-18}$ j $R_H = 109678$ cm^{-1}

$R_H = 13{,}6$ ev.

Donc on a introduit un nombre quantique n qui définit le niveau d'énergie de l'électron, n est appelé le nombre quantique principal.

On introduit un deuxième nombre quantique ɭ appelé nombre quantique secondaire ou nombre quantique azimutal, il définit la forme de l'espace où se trouve l'électron.

ɭ est un nombre positif prend n valeurs : 0, 1, 2, 3, …(n-1). Les différentes valeurs de ɭ définissent la forme de l'orbitale

On introduit un troisième nombre quantique m appelé nombre quantique magnétique

m prend (2ɭ+1) valeurs : -ɭ , -ɭ +1, -ɭ +2, … -1, 0, +1, +2,…ɭ-2, ɭ-1, ɭ m donne le sens de l'orbitale qui contient l'électron.

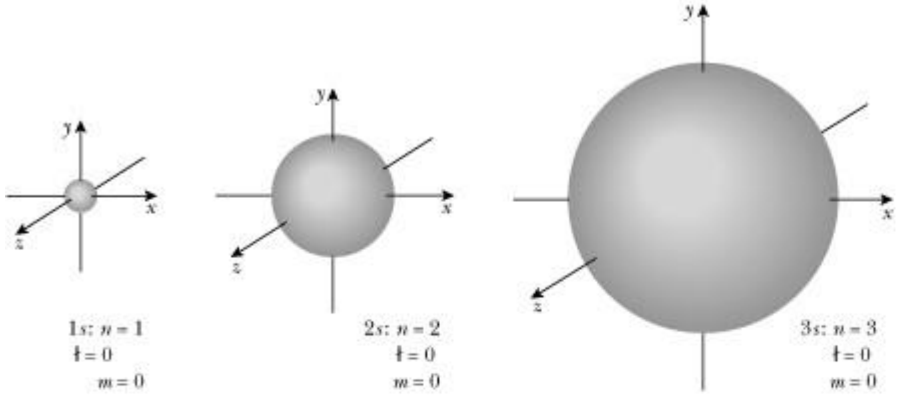
L'utilisation des 3 nombres quantiques n, ɭ et m on trouve n^2 combinaisons possibles pour chaque couche.

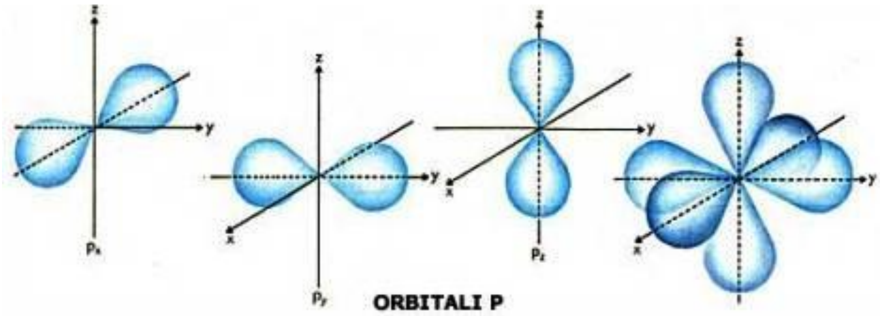
K	n=1	l=0	(s)	m = 0	1 combinaison.
L	n=2	l=0		m = 0	
		l=1	(p)	m =-1	4 combinaison.
				m = 0	
				m = 1	
M	n=2	l=0		m = 0	
		l=1	(p)	m =-1	
				m = 0	
				m = 1	
	n=3	l=2	(d)	m =-2	9 combinaison.
				m =-1	
				m = 0	
				m = 1	
				m = 2	

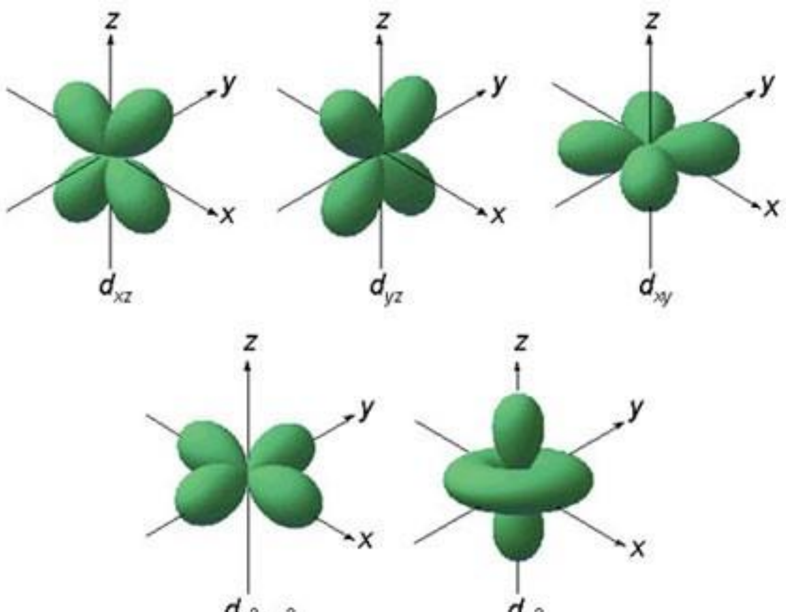
Pour l = 3 (f).

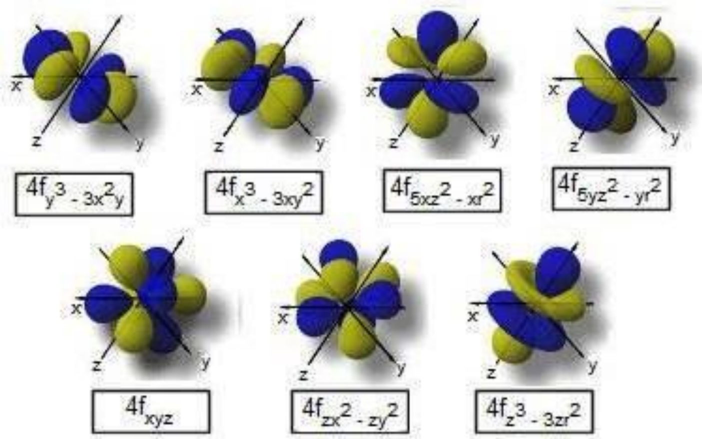
L'électron peut tourner sur lui-même, il y a deux possibilités on introduit un quatrième nombre quantique s appelé nombre de spin.

S prend deux valeurs s=+1/2 et s=1/2. Donc le nombre de combinaisons précédent sera $2n^2$.


1s: n = 1
l = 0
m = 0
2s: n = 2
l = 0
m = 0
3s: n = 3
l = 0
m = 0


p_x
p_y
p_z
ORBITALI P


d_{xz}
d_{yz}
d_{xy}
$d_{x^2-y^2}$
d_{z^2}


$4f_{y^3-3x^2y}$
$4f_{x^3-3xy^2}$
$4f_{5xz^2-xr^2}$
$4f_{5yz^2-yr^2}$
$4f_{xyz}$
$4f_{zx^2-zy^2}$
$4f_{z^3-3zr^2}$