DM20 • Atome de Bohr

En 1913, le physicien danois Niels Bohr (1885-1962) imagine un modèle « planétaire » de l'atome afin d'expliquer les raies émises par des atomes d'hydrogène excités. Ce modèle, aujourd'hui obsolète, ne permit pas d'expliquer les spectres des autres atomes. Une nouvelle physique fut nécessaire : la physique quantique.

Bohr [c. 1922]

Dans le modèle de Bohr, l'atome d'hydrogène est un système à deux corps ponctuels constitué d'un noyau, le proton de masse m_p et charge électrique $+e$, et d'un électron M, de masse m_e et de charge $-e$.
La masse du proton étant près de 2 000 fois celle de l'électron, le proton est considéré comme fixe dans le référentiel d'étude supposé galiléen $\mathcal{R}_g(O, \overrightarrow{e_x}, \overrightarrow{e_y}, \overrightarrow{e_z})$ – où l'origine O correspond au noyau de l'atome.
Données : $h = 6,626.10^{-34}\ J.s$; $\epsilon_0 = 8,84.10^{-12}\ C^2.N^{-1}.m^{-2}$; $c = 3.10^8\ m.s^{-1}$; $m_e = 9,1.10^{-31}\ kg$; $e = 1,6.10^{-19}\ C$.

• **Premier postulat de Bohr :** L'électron se déplace uniquement sur certaines orbites circulaires appelés **états stationnaires**.
Ce mouvement peut être décrit par la physique classique.
D'après Bohr, l'électron a un mouvement circulaire de rayon r et de vitesse v autour de O.
Le champ de pesanteur est négligeable à l'échelle atomique et l'électron n'est soumis qu'à la force d'interaction électrostatique : $\overrightarrow{F} = -\dfrac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}\overrightarrow{e_r}$.

1) Montrer que le mouvement circulaire de l'électron autour du noyau est uniforme et exprimer v^2 en fonction de r, e, m_e et ϵ_0.
2) Exprimer l'énergie cinétique $\mathcal{E}_k(r)$, l'énergie potentielle d'interaction électrostatique $\mathcal{E}_p(r)$ et l'énergie (mécanique) $\mathcal{E}(r)$ de l'électron : $\mathcal{E}(r) = \mathcal{E}_k(r) + \mathcal{E}_p(r)$.

• **Deuxième postulat de Bohr d'après une idée de Planck :** L'électron accéléré par le proton ne peut pas rayonner de façon continue, mais doit attendre de passer d'une orbite permise n à une autre orbite d'énergie inférieure m pour émettre brutalement un **rayonnement sous la forme d'un photon** d'énergie : $h\nu_{n\to m} = \mathcal{E}_n - \mathcal{E}_m$ (avec $n > m$).
$\mathcal{E}_n$ et $\mathcal{E}_m$ sont les énergies des deux états n et m, h s'appelle la constante de Planck et $\nu_{n\to m}$ est la fréquence du rayonnement correspondant à la transition $n \to m$.
• Pour quantifier l'énergie de l'électron, Bohr ajouta un **troisième postulat** ou **condition de quantification** : les seules trajectoires circulaires permises sont celles pour lesquelles le moment cinétique orbital est un multiple entier de la constante de Planck réduite $\hbar$:

$$L_O(M) = n\hbar = n\frac{h}{2\pi}.$$

3) Déterminer la vitesse v de l'électron en fonction de r, m_e, h et du nombre quantique principal n (n entier ≥ 1).
4) Les trajectoires stables de l'électron sont des cercles de rayons r quantifiés par n tel que : $r = n^2 r_0$.
Calculer (en pm) le *rayon de Bohr* noté r_0.
5) En déduire l'énergie totale de l'électron quantifiée sous la forme : $\mathcal{E}_n = -\dfrac{\mathcal{E}_0}{n^2}$.
6) En supposant l'électron dans son état fondamental ($n = 1$), calculer sa vitesse v_0 et l'énergie d'ionisation de l'atome (l'exprimer en eV : $1\ eV = 1,6.10^{-19}\ J$).
L'électron est-il relativiste ?

7) Déterminer l'expression littérale de la constante de RYDBERG R_H relative à l'atome d'hydrogène et calculer sa valeur sachant que :
$\dfrac{1}{\lambda_{n\to m}} = \dfrac{\nu_{n\to m}}{c} = R_H\left(\dfrac{1}{m^2} - \dfrac{1}{n^2}\right)$ (avec $n > m$ et c la vitesse de la lumière dans le vide).

Solution

• Système étudié : $\{M, m, -e\}$, électron dans le référentiel terrestre supposé galiléen $\mathcal{R}_g$.
• Bilan des forces : le poids et l'interaction électrostatique exercée par le proton (O).
Le poids étant négligeable devant cette dernière force, on a : $\overrightarrow{F}_{ext} = \overrightarrow{F} = \dfrac{-e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}\overrightarrow{e_r}$
• Cette force est centrale, donc $\mathcal{M}_O(\overrightarrow{F}) = \overrightarrow{OM} \times \overrightarrow{F} = \overrightarrow{0}$.

1) • Le **P**rincipe **F**ondamental de la **D**ynamique appliqué à l'électron donne :

$$m_e \overrightarrow{a}_{M/\mathcal{R}_g} = \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}\overrightarrow{e_r}$$

• La base adaptée à une trajectoire circulaire ($r = Cste$) et plane est la base polaire $(\overrightarrow{e_r}, \overrightarrow{e_\theta})$.
L'accélération de l'électron dans cette base est : $\overrightarrow{a}_{M/\mathcal{R}_g} = -r\dot{\theta}^2\overrightarrow{e_r} + r\ddot{\theta}\overrightarrow{e_\theta} = -\dfrac{v^2}{r}\overrightarrow{e_r} + \dfrac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}t}\overrightarrow{e_\theta}$
Le **P.F.D.** s'écrit donc : $-\dfrac{v^2}{r}\overrightarrow{e_r} + \dfrac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}t}\overrightarrow{e_\theta} = \dfrac{-e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}\overrightarrow{e_r}$, soit :
↪ En projection selon $\overrightarrow{e_\theta}$: $\dfrac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}t} = 0 \Leftrightarrow \boxed{v = r\dot{\theta} = Cste}$: l'électron a un **mouvement circulaire uniforme** autour du noyau.
↪ En projection selon $\overrightarrow{e_r}$: $-\dfrac{v^2}{r} = \dfrac{-e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \Leftrightarrow \boxed{v = \dfrac{e}{\sqrt{4\pi\epsilon_0 m_e r}}}$ ①

2) • L'énergie cinétique de l'électron dans $\mathcal{R}_g$ est :

$$\boxed{\mathcal{E}_k(M) = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r} = \mathcal{E}_k(r)}$$

• Pour déterminer l'énergie potentielle électrostatique, il faut revenir au travail élémentaire fourni par la force électrostatique $\overrightarrow{F}$:

$$\delta W(\overrightarrow{F}) = \overrightarrow{F}\cdot\mathrm{d}\overrightarrow{OM} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}\overrightarrow{e_r}\cdot(\mathrm{d}r\overrightarrow{e_r} + r\mathrm{d}\theta\overrightarrow{e_\theta}) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}\mathrm{d}r = -\mathrm{d}\mathcal{E}_p(r)$$

D'où : $\mathcal{E}_p(r) = -\dfrac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \mathsf{Cste}$, soit, en prenant $\mathcal{E}_p(r\to\infty) = 0$:

$$\boxed{\mathcal{E}_p(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -2\mathcal{E}_k(r)}$$

• L'énergie totale de l'électron est donc :

$$\boxed{\mathcal{E}(r) = \mathcal{E}_k(r) + \mathcal{E}_p(r) = -\mathcal{E}_k(r) = \frac{\mathcal{E}_p(r)}{2} = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r}} \quad (\star)$$

3) • L'expression du moment cinétique de l'électron dans $\mathcal{R}_g$ évalué en O est :

$$\overrightarrow{L}_{O/\mathcal{R}_g}(M) = \overrightarrow{OM} \times m_e\overrightarrow{v} = r\overrightarrow{e_r} \times m_e v\overrightarrow{e_\theta} = m_e r v\overrightarrow{e_z}$$

• Or, ce moment cinétique est quantifié, d'expression : $L_O(M) = m_e r v = n\dfrac{h}{2\pi}$,
d'où la vitesse de l'électron : $\boxed{v = n\dfrac{h}{2\pi m_e r}}$ ②

4) ① et ② permettent d'écrire : $v = \dfrac{e}{\sqrt{4\pi\epsilon_0 m_e r}} = n\dfrac{h}{2\pi m_e r}$

• Cette équation permet d'établir les rayons des trajectoires circulaires stables de l'électron autour du noyau :

$$\boxed{r = n^2 \frac{\epsilon_0 h^2}{\pi m_e e^2} \equiv n^2 r_0} \quad ③$$

• On en déduit la rayon de Bohr qui correspond à la trajectoire de l'électron dans son état fondamental $n = 1$:

$$\boxed{r_0 = \frac{r}{n^2} = \frac{\epsilon_0 h^2}{\pi m_e e^2} = 53\,pm}$$

5) $(\star) \xrightarrow{③} \mathcal{E}(r) = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r} = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0}\frac{1}{n^2}\frac{\pi m_e e^2}{\epsilon_0 h^2}$

Ainsi :

$$\boxed{\mathcal{E}(r) = -\frac{\mathcal{E}_0}{n^2}} \quad \text{avec} \quad \boxed{\mathcal{E}_0 = \frac{m_e e^4}{8\epsilon_0^2 h^2}} \quad ④$$

6) • Lorsque l'électron est dans son état fondamental, c'est-à-dire dans son état de plus basse énergie ($n = 1$) correspondant à l'orbite la plus proche du noyau : $\mathcal{E}(r) = -\mathcal{E}_0 = -13,6\,eV$

• **Définition :** L'**énergie d'ionisation d'un atome** est l'énergie minimale à fournir à un atome gazeux $X_{(g)}$ dans son état fondamental pour lui arracher un électron.

Elle correspond au processus : $X_{(g)} \xrightarrow{\Delta\mathcal{E}_{ion}} X^+_{(g)} + e^-_{(g)}$.

Cette définition appliquée à l'atome d'hydrogène :

$$\underbrace{H_{(g)}}_{\text{État initial : } n=1} \xrightarrow{+\mathcal{E}_{ion}} \underbrace{H^+_{(g)} + e^-_{(g)}}_{\text{État final :} n \to \infty}$$

D'où : $\boxed{\mathcal{E}_{ion} = \mathcal{E}(n \to \infty) - \mathcal{E}(n = 1) = \mathcal{E}_0 = 13,6\ eV}$

• dans l'état fondamental, la vitesse de l'électron est, d'après ② et ④ :

$$\boxed{v_0 = \frac{h}{2\pi m_e r_0} = 2,2.10^6\ m.s^{-1}}$$

• Cette vitesse reste éloignée de la vitesse de la lumière dans le vide ($\frac{v}{c} < 0,1$) : l'électron n'est pas relativiste.

7) Pour déterminer la constante de Rydberg, écrivons l'énergie de l'électron dans les deux niveaux quantiques n et m considérés :

• Niveau supérieur n : $\mathcal{E}_n = -\frac{\mathcal{E}_0}{n^2}$

• Niveau inférieur $m < n$: $\mathcal{E}_m = -\frac{\mathcal{E}_0}{m^2} < \mathcal{E}_n$

• Lorsque l'atome dans le niveau d'énergie supérieur n se désexcite en passant dans le niveau d'énergie inférieur m, il libère un photon d'énergie $h\nu_{n\to m}$ telle que :

$$h\nu_{n\to m} = \mathcal{E}_n - \mathcal{E}_m = \mathcal{E}_0\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right) \equiv h\frac{c}{\lambda_{n\to m}}$$

Ainsi, le nombre d'onde de ce photon est : $\frac{1}{\lambda_{n\to m}} = \frac{\mathcal{E}_0}{c}\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right) \equiv R_H\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right)$

D'où :

$$\boxed{R_H = \frac{\mathcal{E}_0}{c} = \frac{m_e e^4}{8\epsilon_0^2 h^2 c} = 1,09.10^7\ m^{-1}}$$

Rq : Le succès de la théorie de Bohr vient de la coïncidence entre les valeurs expérimentales de la constante de Rydberg et la valeur calculée.

DM20 • M6/7