3. Théorie de BOHR

On traite l'atome d'Hydrogène (1 électron/1 proton) ou hydrogénoide (1 électron/Z protons).On suppose une trajectoire circulaire (de rayon r) et une vitesse v de l'électron de masse m_0 ($m_0 \approx m_0$). L'énergie totale de l'électron est la somme de son énergie cinétique et de son énergie potentielle: $W = \frac{1}{2}m_0 v^2 + E_P$

Le terme d'énergie potentielle est d'origine électrostatique (charge q = -e à la distance r du noyau de charge q' = +e):. On obtient donc: $E_P = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r} \quad \{1\}$

En écrivant que la force d'attraction électrostatique (électron-noyau) égale la force centrifuge qui s'exerce sur l'électron (masse m_0, à la distance constante r, vitesse v): $m_0\frac{v^2}{r} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r^2} \{2\}$ et en reportant dans la relation {1}, on obtient $W = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{2r} = -\frac{1}{2}m_0 v^2 \{3\}$ et dans le cas plus général d'un atome hydrogénoï de : $W = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{2r}$

En 1905, au cours de ses travaux sur l'Effet Photoélectrique, EINSTEIN avait conclu que la discontinuité des spectres optiques s'interprète par des transitions depuis des niveaux d'énergie différents: $\Delta W = W_{Niveau\,2} - W_{Niveau\,1} = h\upsilon$ (*h* constante de PLANCK - 1901). BOHR propose de quantifier les transitions énergétiques (Théorie des quantas):

Le moment de la quantité de mouvement de l'électron par rapport au centre de l'orbite
ne peut prendre que des valeurs entières multiples de h/2π

$$(m_0 v)r = n\frac{h}{2\pi} \quad \{4\}$$

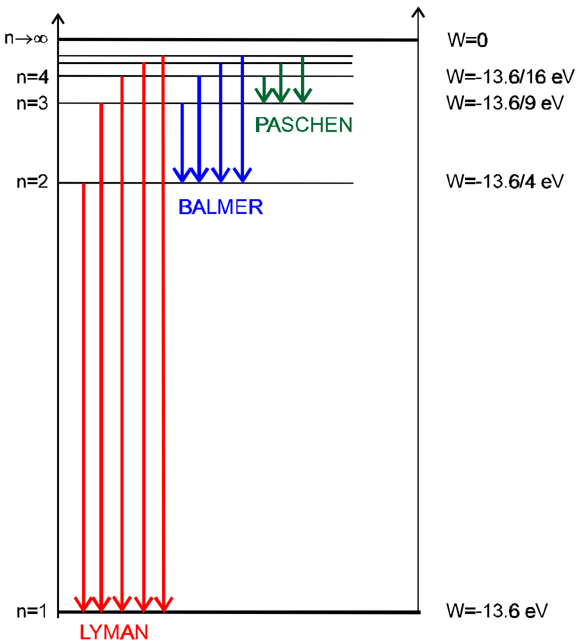
$$\text{d'où : } W_n = \frac{W_n^2}{W_n} = \frac{\frac{1}{16\pi^2\varepsilon_0^2}\frac{e^4}{4r^2}}{-m_0\frac{v^2}{2}} = -\frac{e^4 m_0}{32\pi^2\varepsilon_0^2(m_0 vr)^2} = -\frac{e^4 m_0}{32\pi^2\varepsilon_0^2(n\frac{h}{2\pi})^2} = -\frac{e^4 m_0}{8\pi^2\varepsilon_0^2 h^2}\frac{1}{n^2}$$

cette expression peut s'identifier à $W = -hcR_H\frac{1}{n^2}$, alors on retrouve: $R_H = \frac{e^4 m_0}{8\varepsilon_0^2 h^3 c} = 109677.6\text{cm}^{-1}$

L'énergie de l'électron varie avec l'inverse du carré du nombre entier *n* et peut donc prendre les valeurs prévues par la relation: $W_n == -\frac{e^4 m_0}{8\pi^2\varepsilon_0^2 h^2}\frac{1}{n^2} = -K\frac{1}{n^2}$ où *n* est le nombre quantique principal et *K* une constante positive.

Pour n=1, l'énergie est la plus basse possible (Etat fondamental) : $W_{n=1}$= -13.6 eV= -21.76 10^{-19}J.

Les relations : $m_0\frac{v^2}{r} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r^2} \{2\}$ et $(m_0 v)r = n\frac{h}{2\pi} \quad \{4\}$ conduisent à : $r = n^2\frac{h^2\varepsilon_0}{\pi m_0 e^2} = n^2 a_0$, avec $a_0 = \frac{h^2\varepsilon_0}{\pi m_0 e^2}$ = 0.529 Å, c'est le rayon de BOHR



L'énergie de l'électron varie donc avec l'inverse du carré de ***n***
et la distance moyenne de l'électron au noyau varie avec le carré de ***n***.